

PCT

WELTORGANISATION FÜR GEISTIGES EIGENTUM
Internationales Büro
 INTERNATIONALE ANMELDUNG VERÖFFENTLICHT NACH DEM VERTRAG ÜBER DIE
INTERNATIONALE ZUSAMMENARBEIT AUF DEM GEBIET DES PATENTWESENS (PCT)

(51) Internationale Patentklassifikation ⁶ : C07D 235/20, A61K 31/485, C07D 211/58, A61K 31/445, C07D 279/18, A61K 31/155, C07C 237/10, A61K 31/16, C07D 213/44, 213/82	A2	(11) Internationale Veröffentlichungsnummer: WO 99/40073 (43) Internationales Veröffentlichungsdatum: 12. August 1999 (12.08.99)
(21) Internationales Aktenzeichen: PCT/EP99/00727 (22) Internationales Anmeldedatum: 4. Februar 1999 (04.02.99) (30) Prioritätsdaten: 198 04 761.4 6. Februar 1998 (06.02.98) DE 198 51 300.3 6. November 1998 (06.11.98) DE (71) Anmelder (für alle Bestimmungsstaaten ausser US): MAX-PLANCK-GESELLSCHAFT ZUR FÖRDERUNG DER WISSENSCHAFTEN E.V. [DE/DE]; Hofgartenstrasse 2, D-80539 München (DE). BYK GULDEN LOMBERG CHEMISCHE FABRIK GMBH [DE/DE]; Byk-Gulden-Strasse 2, D-78467 Konstanz (DE). (72) Erfinder; und (75) Erfinder/Anmelder (nur für US): BODE, Wolfram [DE/DE]; Tulpenstrasse 5, D-82131 Gauting (DE). MORODER, Luis [DE/DE]; Alexander-Fleming-Strasse 10, D-82152 Martinsried (DE). PEREIRA, Pedro Jose Barbosa [PT/DE]; Schwalbenweg 9, D-82152 Krailling (DE). BERGNER, Andreas [DE/DE]; Ammerseestrasse 8, D-82061 Neuried (DE). HUBER, Robert [DE/DE]; Schlesierstrasse 13, D-82110 Germering (DE). SOMMERHOFF, Christian		[DE/DE]; Denninger Strasse 146, D-81927 München (DE). SCHASCHKE, Norbert [DE/DE]; Hansastrasse 101, D-81373 München (DE). BÄR, Thomas [DE/DE]; Blarerstrasse 16, D-78462 Konstanz (DE). MARTIN, Thomas [DE/DE]; Sonnenbühlstrasse 73, D-78464 Konstanz (DE). STADLWIESER, Josef [AT/DE]; Im Apfelgarten 3, D-78465 Konstanz (DE). ULRICH, Wolf-Rüdiger [DE/DE]; Hebelstrasse 3, D-78464 Konstanz (DE). DOMINIK, Andreas [DE/DE]; Engelbert-Weltin-Weg 1, D-78476 Allensbach (DE). THIBAUT, Ulrich [DE/DE]; Egger Wiese 14, D-78464 Konstanz (DE). BUNDSCHUH, Daniela [DE/DE]; Rheingutstrasse 17, D-78462 Konstanz (DE). BEUME, Rolf [DE/DE]; Bohlstrasse 13, D-78465 Konstanz (DE). GOEBEL, Karl-Josef [DE/DE]; Im Kirchental 12, D-78315 Radoifzell (DE). (74) Anwälte: WEICKMANN, H. usw.; Kopernikusstrasse 9, D-81679 München (DE). (81) Bestimmungsstaaten: AL, AM, AT, AU, AZ, BA, BB, BG, BR, BY, CA, CH, CN, CU, CZ, DE, DK, EE, ES, FI, GB, GD, GE, GH, GM, HR, HU, ID, IL, IN, IS, JP, KE, KG, KP, KR, KZ, LC, LK, LR, LS, LT, LU, LV, MD, MG, MK, MN, MW, MX, NO, NZ, PL, PT, RO, RU, SD, SE, SG, SI, SK, SL, TJ, TM, TR, TT, UA, UG, US, UZ, VN, YU, ZW, ARIPO Patent (GH, GM, KE, LS, MW, SD, SZ, UG, ZW), eurasisches Patent (AM, AZ, BY, KG, KZ, MD, RU, TJ, TM), europäisches Patent (AT, BE, CH, CY, DE, DK, ES, FI, FR, GB, GR, IE, IT, LU, MC, NL, PT, SE), OAPI Patent (BF, BJ, CF, CG, CI, CM, GA, GN, GW, ML, MR, NE, SN, TD, TG). Veröffentlicht Ohne internationalen Recherchenbericht und erneut zu veröffentlichen nach Erhalt des Berichts.
(54) Title: TRYPTASE INHIBITORS (54) Bezeichnung: TRYPTASE-INHIBITOREN <div style="display: flex; justify-content: space-around; align-items: center;"> <div style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} \diagup K1 \\ L \\ \diagdown K2 \end{array} \quad (I)$ </div> <div style="text-align: center;"> $\begin{array}{c} B1 - A1 - B3 - A3 - B5 - A5 - \\ B2 - A2 - B4 - A4 - B6 - A6 - \end{array} \quad (II)$ </div> </div> (57) Abstract <p>The invention relates to bifunctional inhibitors of human tryptase of formula (I), to human tryptase in crystalline form, to a method for producing human tryptase in crystalline form, to pharmaceutical compositions comprising a bifunctional inhibitor of human tryptase, and to a method for developing and identifying tryptase inhibitors. The tryptase inhibitors are characterized in that both head groups K1 and K2 are the same or different and each comprises a group Q which can interact with a carboxylate group. The linker L can assume a conformation such that the groups Q of both head groups are situated at a distance ranging from 20 to 45 Å, such that the dimension of the head groups and of the linker permit the inhibitor to penetrate into a cavity with the dimensions 52 Å X 32 Å X 40 Å, and such that L represents formula (II) wherein A1 and A2 are the same or different, and represent -C(O)-, NH-, -O- (oxygen), -S- (sulfur), -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- or a bond. A3 and A4 are the same or different and represent -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- or a bond, or are selected from the group A5, A6, M, B1-B6 as stated in the description.</p>		

(57) Zusammenfassung

Die Erfindung betrifft bifunktionelle Inhibitoren von humaner Tryptase der Formel (I), humane Tryptase in kristallisierter Form, ein Verfahren zur Herstellung von humaner Tryptase in kristallisierter Form, pharmazeutische Zusammensetzungen, umfassend einen bifunktionellen Inhibitor von humaner Tryptase sowie ein Verfahren zur Entwicklung und Identifizierung von Tryptase-Inhibitoren, dadurch gekennzeichnet, dass die beiden Kopfgruppen K1 und K2 gleich oder verschieden sind und jeweils eine Gruppe Q umfassen, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen kann, der Linker L eine Konformation einnehmen kann, so daß die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen in einem Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen, die Ausmaße der Kopfgruppen und des Linkers das Eindringen des Inhibitors in einen Hohlraum mit den Dimensionen 52 Å x 32 Å x 40 Å erlauben, und L für die Formel (II) steht, worin A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)2-, -S(O)2-NH-, -NH-S(O)2-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten, A3 und A4 gleich verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe A5, A6, M, B1-B6 wie in der Beschreibung.

LEDIGLICH ZUR INFORMATION

Codes zur Identifizierung von PCT-Vertragsstaaten auf den Kopfbögen der Schriften, die internationale Anmeldungen gemäss dem PCT veröffentlichen.

AL	Albanien	ES	Spanien	LS	Lesotho	SI	Slowenien
AM	Armenien	FI	Finnland	LT	Litauen	SK	Slowakei
AT	Österreich	FR	Frankreich	LU	Luxemburg	SN	Senegal
AU	Australien	GA	Gabun	LV	Lettland	SZ	Swasiland
AZ	Aserbaidshan	GB	Vereinigtes Königreich	MC	Monaco	TD	Tschad
BA	Bosnien-Herzegowina	GE	Georgien	MD	Republik Moldau	TG	Togo
BB	Barbados	GH	Ghana	MG	Madagaskar	TJ	Tadschikistan
BE	Belgien	GN	Guinea	MK	Die ehemalige jugoslawische Republik Mazedonien	TM	Turkmenistan
BF	Burkina Faso	GR	Griechenland			TR	Türkei
BG	Bulgarien	HU	Ungarn	ML	Mali	TT	Trinidad und Tobago
BJ	Benin	IE	Irland	MN	Mongolei	UA	Ukraine
BR	Brasilien	IL	Israel	MR	Mauritanien	UG	Uganda
BY	Belarus	IS	Island	MW	Malawi	US	Vereinigte Staaten von Amerika
CA	Kanada	IT	Italien	MX	Mexiko	UZ	Usbekistan
CF	Zentralafrikanische Republik	JP	Japan	NE	Niger	VN	Vietnam
CG	Kongo	KE	Kenia	NL	Niederlande	YU	Jugoslawien
CH	Schweiz	KG	Kirgisistan	NO	Norwegen	ZW	Zimbabwe
CI	Côte d'Ivoire	KP	Demokratische Volksrepublik Korea	NZ	Neuseeland		
CM	Kamerun			PL	Polen		
CN	China	KR	Republik Korea	PT	Portugal		
CU	Kuba	KZ	Kasachstan	RO	Rumänien		
CZ	Tschechische Republik	LC	St. Lucia	RU	Russische Föderation		
DE	Deutschland	LI	Liechtenstein	SD	Sudan		
DK	Dänemark	LK	Sri Lanka	SE	Schweden		
EE	Estland	LR	Liberia	SG	Singapur		

Tryptase-Inhibitoren

Beschreibung

5

Die Erfindung betrifft bifunktionelle Inhibitoren von humaner Tryptase, humane Tryptase in kristallisierter Form, ein Verfahren zur Herstellung von humaner Tryptase in kristallisierter Form, pharmazeutische Zusammensetzungen, umfassend einen bifunktionellen Inhibitor von humaner Tryptase sowie ein Verfahren zur Entwicklung und Identifizierung von Tryptase-Inhibitoren.

10

Humane Tryptase ist eine Serinproteinase, die in humanen Mastzellen das überwiegend vorliegende Protein darstellt. Tryptase umfaßt vier eng verwandte Enzyme (α , I, II/ β , III; mit 90 bis 98 % Sequenzidentität) (vgl. Miller et al., J.Clin.Invest. 84 (1989) 1188-1195; Miller et al., J.Clin.Invest. 86 (1990) 864-870; Vanderslice et al., Proc.Natl.Acad.Sci., USA 87 (1990) 3811-3815). Mit Ausnahme der α -Tryptase (Schwartz et al., J.Clin.Invest. 96 (1995) 2702-2710; Sakai et al., J.Clin.Invest. 97 (1996) 988-995) werden die Enzyme intrazellulär aktiviert und in katalytisch aktiver Form in Sekretgranulen gelagert.

15

Tryptase weist im Vergleich zu anderen bekannten Serinproteinasen, wie z.B. Trypsin oder Chymotrypsin einige besondere Eigenschaften auf (Schwartz et al., Methods Enzymol. 244, (1994), 88-100; G.H. Caughey, "Mast cell proteases in immunology and biology." Marcel Dekker, Inc., New York, 1995). Tryptase aus humanem Gewebe weist eine nicht kovalent verknüpfte tetramere Struktur auf, die durch Heparin oder andere Proteoglycane stabilisiert sein muss, um proteolytisch aktiv zu sein.

20

Weiterhin ist bis jetzt kein Faktor im Serum bekannt, der Tryptase hemmt. Es ist bis jetzt nicht gelungen, einen endogenen Inhibitor für Tryptase aufzufinden. Tryptase wird auch mit Ausnahme des atypischen Inhibitors LDTI (Leech Derived Tryptase Inhibitor) (Sommerhoff et al., Biol.Chem.Hoppe-Seyler 375 (1994) 685-694) nicht durch natürlich auftretende Proteinaseinhibitoren gehemmt.

25

Weiterhin weist Tryptase eine unübliche, sehr enge Substratspezifität auf, wobei eine Reihe von Peptidsubstraten in vitro gespalten werden (Tam et al., Am.J.Respir.Cell Mol. Biol. 3 (1990) 27-32), aber nur wenige ausgewählte Proteine. Beispielsweise werden Fibrinogen, Fibronectin und hochmolekulares Kininogen inaktiviert (Schwartz et al., J.Immunol., 135(4) (1985), 2762-2767; Lohi et al., J. Cell. Biochem. 50, (1992), 337-349; Little et al., Biochem. J. 307 (1995) 341-346) und die Zymogene von Stromelysin (proMMP-3) und der Plasminogenaktivator des Urokinasetyps (pro-uPA) aktiviert (Gruber et al., J. Clin. Invest. 84 (1989), 1657-1662; Lees et

30

35

al., Eur. J. Biochem. 223 (1994), 171-177; Stack et al., J. Biol. Chem. 269 (1994), 9416-9419). Weiterhin wurde festgestellt, dass Tryptase mitogene Wirkungen zeigt (Ruoss et al., J. Clin. Invest. 88 (1991), 493-499; Hartmann et al., Am. J. Physiol. 262 (1992), L528-L534; Brown et al., Am. J. Respir. Cell Mol. Biol. 13 (1995), 227-236).

5

Tryptase wird zusammen mit anderen Entzündungsmediatoren, wie z.B. Histamin und Proteoglycanen, freigesetzt, wenn humane Mastzellen aktiviert werden. Man vermutet deshalb, dass Tryptase bei einer Reihe von Erkrankungen, insbesondere bei allergischen und entzündlichen Erkrankungen eine Rolle spielt, zum einen aufgrund der Bedeutung von Mastzellen bei solchen Erkrankungen und zum anderen, da bei einer Reihe derartiger Erkrankungen ein erhöhter Tryptase-Gehalt festgestellt wurde. So wird Tryptase u.a. mit folgenden Erkrankungen in Zusammenhang gebracht: Akute und chronische (insbesondere entzündliche und allergen induzierte) Atemwegserkrankungen verschiedener Genese (z. B. Bronchitis, allergische Bronchitis, Asthma bronchiale, COPD); interstitielle Lungenerkrankungen; Erkrankungen, die auf allergischen Reaktionen der oberen Atemwege (Rachenraum, Nase) und der angrenzenden Regionen (z. B. Nasennebenhöhlen, Augenbindehäute) beruhen, wie beispielsweise allergische Konjunktivitis und allergische Rhinitis; Erkrankungen aus dem Formenkreis der Arthritis (z. B. rheumatische Arthritis); Autoimmun-Erkrankungen wie Multiple Sklerose; desweiteren Periodontitis, Anaphylaxis, interstitielle Cystitis, Dermatitis, Psoriasis, Sklerodermie/systemische Sklerose, entzündliche Darmerkrankungen (Morbus Crohn, Inflammatory Bowel Disease) und andere. Tryptase scheint insbesondere direkt mit der Pathogenese von Asthma in Zusammenhang zu stehen (Caughey, Am. J. Respir. Cell Mol. Biol. 16 (1997), 621-628; R. Tanaka, „The role of tryptase in allergic inflammation“ in: Protease Inhibitors, IBC Library Series, 1979, Kapitel 3.3.1-3.3.23).

25

Zur genauen Untersuchung der Funktion von Tryptase, insbesondere bei allergischen und entzündlichen Erkrankungen, ist jedoch die Entwicklung von selektiven Tryptase-Inhibitoren notwendig. Bisher wurden Tryptase-Inhibitoren auf Grundlage der dem Trypsin ähnlichen Aktivität und Spezifität von Tryptase entworfen und synthetisiert, wobei zumeist von einer Benzamidingruppe als Substratrest ausgegangen worden ist. Mehr oder weniger gute Inhibitoren wurden durch die Methode "trial and error" gefunden, wobei insbesondere Benzamidin- und ähnliche Strukturen mit mehr oder weniger starren und hydrophoben Gruppen derivatisiert wurden. Ein Beispiel hierfür ist 4-Amidinophenylbrenztraubensäure (APPA, Amidinophenyl pyruvic acid; Stürzebecher et al., Biol. Chem. Hoppe-Seyler 373 (1992), 1025-1030). Solche Inhibitoren auf Benzamidinbasis sind jedoch nicht selektiv für Tryptase, sondern hemmen auch andere physiologisch wichtige Enzyme, wie beispielsweise Thrombin, Faktor Xa und Urokinase. Sie sind deshalb nicht zur selektiven Untersuchung der Funktion von Tryptase verwendbar.

30
35

- Weiterhin wurde im Stand der Technik ein peptidischer Tryptaseinhibitor, nämlich N-(1-Hydroxy-2-naphthoyl)-L-arginyl-L-prolinamid, beschrieben (R. Tanaka, *Protease Inhibitors*, IBC Series 1997, Kapitel 3.3; Clark et al., *Drugs of the future* 21 (8) (1996), 811-816; WO 94/20527).
- 5 Auch dieser Inhibitor ist jedoch nicht selektiv für Tryptase, sondern hemmt auch andere Proteinasen wie etwa Trypsin und Thrombin, sodass nicht eindeutig festgestellt werden kann, ob beobachtete Wirkungen aufgrund einer spezifischen Hemmung von Tryptase erzielt werden oder vielmehr durch andere Vorgänge.
- 10 Ein weiterer im Stand der Technik beschriebener Tryptaseinhibitor ist LDTI, ein Inhibitor vom Kazal-Typ, der aus Blutegeln isoliert wurde (LDTI, leech-derived tryptase inhibitor) (WO95/03333; Stubbs et al., *J. Biol. Chem.* 272 (32) (1979), 19931-19937; WO97/22626). Es handelt sich um einen proteinartigen Inhibitor, dessen Struktur anhand von NMR-Daten und von LDTI-, Trypsin-Kristallen bestimmt wurde. Dabei wurde festgestellt, dass der basische
- 15 Aminoterminus von LDTI vermutlich einen elektrostatischen Beitrag zur Wechselwirkung mit Tryptase liefert. Bei LDTI handelt es sich zwar um einen Inhibitor mit hoher Affinität zu Tryptase (K_i von 1,4 nM), LDTI inhibiert aber auch Trypsin und Chymotrypsin im nanomolaren Bereich.

Als weiterer Inhibitor von Tryptase wurde SLPI (Sekretory leucocyte protease inhibitor) vorgeschlagen (WO96/08275 A1). Auch hierbei handelt es sich um einen proteinartigen Inhibitor. WO95/32945, WO96/09297 und WO98/04537 schließlich beschreiben niedermolekulare Verbindungen als Tryptaseinhibitoren. Diese Verbindungen weisen an den Enden überwiegend Amino, Guanidino oder Amidinogruppen auf. Die Wirksamkeit dieser Verbindungen wird ebenfalls durch "trial and error" bestimmt.

- 25 Eine Aufgabe der vorliegenden Erfindung war es deshalb, hochspezifische Inhibitoren von humaner Tryptase bereitzustellen, deren Wirksamkeit anhand struktureller Parameter zuverlässig vorausgesagt werden kann. Diese Aufgabe wird erfindungsgemäß gelöst durch einen bifunktionellen Inhibitor von humaner Tryptase, der dadurch gekennzeichnet ist, dass er
- 30 zwei Kopfgruppen K1 und K2 umfasst, die durch einen Linker L verbunden sind, wobei K1 und K2 gleich oder verschieden sind und jeweils eine Gruppe Q umfassen, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen kann, wobei der Linker L eine solche Konformation einnehmen kann, dass die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen in einem Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen, und wobei die Ausmaße der Kopfgruppen und des Linkers das Eindringen des
- 35 Inhibitors in einen Hohlraum mit den Dimensionen 52 Å x 32 Å x 40 Å erlauben. Ausführungsformen der Gruppe Q werden hierin auch als Gruppe X1, X2 bzw. Gruppe Y1, Y2 bezeichnet und werden nachfolgend näher definiert.

Es ist überraschenderweise gelungen, Kristalle von humaner β -Tryptase aus Mastzellen zu erhalten und eine Röntgenkristallstrukturanalyse durchzuführen. Diese hat eine exakte Bestimmung der räumlichen dreidimensionalen Geometrie des Tryptase-Tetramers ermöglicht, wodurch wichtige Erkenntnisse im Hinblick auf die Entwicklung von Tryptase-Inhibitoren erhalten wurden.

Es wurde gefunden, dass in den Kristallen flache, quadratische, rahmenartige Tetramere mit den Dimensionen $82 \times 80 \times 40 \text{ \AA}$ aufeinander entlang einer 4_1 -Schraubenachse gestapelt sind. Entlang seiner vier Kanten befindet sich jedes Tetramer in engem Kontakt mit Symmetrieverwandten Nachbarn, sodass sich ausgedehnte Schichten bilden. Innerhalb eines Tetramers befindet sich eine Tryptaseeinheit an jeder Ecke des Tetramers, d.h. jedes der vier, chemisch identischen Monomeren besetzt eine Ecke des flachen Rahmens mit nahezu quadratischer Gestalt. Die vier Tryptaseeinheiten des Tetramers begrenzen einen zentralen, ovalen Kanal bzw. eine zentrale Pore mit den ungefähren Ausmaßen $52 \times 32 \times 40$ (Tiefe) \AA . Die beiden Eingänge zu dieser Pore sind teilweise durch eine von jedem der Monomeren vorspringende Peptidschleife verstellt (147er-Schleife). Dies bewirkt, dass sich die Pore im Inneren zu einer größeren Höhle erweitert.

Die gefundene flache, rahmenförmige Struktur des Tryptasetetramers ist überraschend und unterscheidet sich grundsätzlich von den bisher veröffentlichten schematischen Tryptasemodellen, in denen eine kompakte, "quasi-tetraedrische" Struktur angegeben worden ist (Johnson et al., Protein Sci. 1, (1992), 370-377; Matsumoto et al., J. Biol. Chem. 270 (1995), 19524-19531; G.H. Caughey, Am. J. Respir. Cell Mol. Biol. 16 (1997), 621-628).

Alle Tryptaseeinheiten des Tetramers sind nahezu identisch in ihrer Struktur und unterscheiden sich lediglich durch ihre relative Orientierung und durch die Kontakte zu ihren Nachbarn. Das Tetramer besitzt deshalb eine quasi- 2_2 -Symmetrie, wobei die vier (quasi) äquivalenten Einheiten in einem rechteckigen, flachen Ring angeordnet sind. Von den vier Monomeren, die im folgenden im Uhrzeigersinn mit A, B, C und D bezeichnet werden (vgl. Figur 1), sind A mit C und B mit D identisch. Das Tryptasemonomer A berührt seinen Nachbarn B und D über zwei unterschiedliche Kontaktflächen, von etwa 500 bzw. 1100 \AA^2 . Die Tryptaseeinheiten A und D (ebenso wie B und C), die über 2-zählige Rotationsachsen ineinander überführbar sind, sind miteinander durch eine langgestreckte periphere Brücke verbunden, wobei neben hydrophoben auch polare Wechselwirkungen zur Bindung beitragen. An der peripheren Oberfläche des A-D (und des entsprechenden B-C) Homodimers werden positive Ladungen durch angrenzende negative Ladungen ausgeglichen, was in einem relativ schwachen elektrostatischen Potential resultiert.

Im Gegensatz dazu ist die 2-zählige Symmetrie zwischen den Monomeren A und B (ebenso wie zwischen den Monomeren C und D) lokal gestört, und die beiden Monomeren berühren sich über eine vergleichsweise kleine und damit relativ gering stabile, hydrophobe Kontaktfläche. Diese zentrale, zirkuläre Kontaktfläche besteht ausschließlich aus hydrophoben Wechselwirkungen. Unter physiologischen Bedingungen wird das A-B (wie auch das C-D) Homodimer durch Heparinketten zusammengehalten, die an den positiv geladenen peripheren Flächen ansetzen. Das A-B-Homodimer (sowie das äquivalente C-D-Homodimer) trägt nämlich an seiner peripheren Oberfläche eine Reihe von positiv geladenen Resten, die ein positives elektrostatisches Potential bilden.

10

Jedes Tryptase-Monomer besteht aus 246 Aminosäuren (vgl. Figur 4) und hat je nach Glykosilierungsgrad ein Molekulargewicht von 31 bis 34 kDa. Die Kernstruktur eines jeden Monomers besteht, ähnlich der aller anderen Trypsin-ähnlichen Serinproteinasen, aus zwei 6-strängigen β -Fässern (vgl. Figur 3). Diese β -Fässer werden durch drei Trans-Domänensegmente zusammengehalten und enthalten an ihrer Oberfläche weiterhin zwei Helizes und eine Reihe von Peptidschleifen. Die katalytischen Reste Ser195, His57 und Asp102 (die Bezeichnung erfolgt nach der sogenannten Chymotrypsinogen-Numerierung, die aufgrund der topologischen Ähnlichkeit zum Rinder-Chymotrypsinogen A definiert wird, vgl. Figur 4) sind in der Kontaktlinie zwischen den beiden Fässern angeordnet, während die aktive Zentrums-Spalte senkrecht zu beiden verläuft.

Der Tryptasekern, bestehend aus etwa 165 Resten, ist topologisch den Kernbereichen der Referenz-Proteinasen Trypsin und Chymotrypsin ähnlich. Die zusätzlichen Reste der Tryptase (15 bzw. 22) haben jedoch deutliche Konformationsunterschiede, insbesondere unterschiedliche Schleifenstrukturen. So zeigen sich drastische Unterschiede hinsichtlich Länge und Geometrie in sechs oberflächlichen Peptidschleifen, die das aktive Zentrum umstehen (die 70 bis 80er-Schleife, die 147er-Schleife mit dem anhängenden 152er-Sporn, die 37er-Schleife, die 60er-Schleife, die 170er-Schleife und die 97er-Schleife). Die Monomere A und B berühren sich dabei über die drei erstgenannten Schleifen, während die Monomere A und D über die drei letztgenannten Schleifen miteinander in Kontakt stehen. Die 60er-Schleife, die fünf insertierte Reste enthält, läuft abrupt von der Spalte weg Richtung Norden (die angegebenen relativen Richtungen beziehen sich auf die in Figur 2 gezeigte Orientierung), wo sie am cisPro 60 A knickt, um sich langsam dem allgemeinen Hauptkettenverlauf anderer Serinproteinasen anzunähern. Position 69, die in allen anderen homologen Proteinasen strikt für ein Gly vorbehalten ist, weist in Tryptase einen Arg-Rest auf. Die nachfolgende 70 bis 80er-Schleife, welche sich in den Calcium-bindenden Serinproteinasen um ein stabilisierendes Calciumion windet (Bode et al., J. Mol. Biol. 98 (1975) 693-717), ist in Tryptase kompakter und um drei Aminosäuren kürzer. Sie dient vermutlich nicht zur Calcium-Bindung, trotz topologisch ähnlicher

Ligandengruppen (Glu70, Asp80, Carbonyl 72 und 75). Die 97er Schleife, die den Nordrand der Spalte bildet, umfasst die gleiche Anzahl an Resten, die jedoch eine unterschiedliche Anordnung aufweisen: Ala97 nimmt die normalerweise durch den Rest 99 besetzte Position ein. Außerdem weist sie eine unübliche, zum Asp102 führende helikale Windung auf. Die 147er-Schleife (a/s "Autolyseschleife" in Pankreas-Proteinasen bezeichnet), die die Südwand der aktiven Spalte zusammen mit Gln192 bildet, ist um einen Rest kürzer bis Leu151. Die folgende, zwei Insertionsreste umfassende unübliche Pro152-Pro152A-cisPro152B-Phe153-Pro154-Sequenz bildet einen hydrophoben 152-"Sporn". Die mit neun Resten größte Insertion tritt in der 173-Schleife auf, welche der unüblich langen 3-wendigen "Zwischenhelix" (Helix α 1, vgl. Figur 4) folgt. Die zehn Reste von His173 bis Val173I bilden eine verlängerte offene 173er-Biegung, die um die Imidazolseitenkette von His173 angeordnet ist.

Das aktive Zentrum und seine Umgebung sind im Trypsasemonomer in ihrer Struktur sehr ähnlich wie im Trypsin. Die sogenannte S1-Spezifitätstasche (mit P1, P2 usw. bzw. P1', P2' usw. werden im Folgenden die Peptidpositionen N- bzw. C-terminal der zu spaltenden Peptidbindung eines gebundenen Peptidsubstrats und mit S1, S2 etc. bzw. S1', S2' etc. die entsprechenden Bindungsstellen am Enzym bezeichnet), die sich links (hinsichtlich der sogenannten Standard-Orientierung, definiert durch eine horizontal verlaufende, dem Betrachter zugewandete aktive Zentrum-Spalte, in der gebundene Peptidsubstrate von links nach rechts laufen würden; vgl. Figur 3) vom reaktiven Ser195 öffnet, ist praktisch identisch zu der im Trypsin hinsichtlich der Konformation der umgebenden Hauptketten mit ihrem "Eingangsrahmen" Val213-Ser214-Trp215-Gly216-Glu217-Gly219-Cys220 (wobei Glu217 eine Ausnahme darstellt), ihrer "inneren Wand" Gly226-Ile227 (anstelle von Val) -Tyr228, ihrem "Boden" Asp189-Ser190-Cys191-Gln192-Gly193-Asp194-Ser195 und der abschließenden Disulfidbrücke Cys191 bis Cys220, und eignet sich zur Aufnahme von P1-Lysin- oder Arginin-Seitenketten.

In diese Tasche ragt die Amidinophenylgruppe der Amidinophenylbrenztraubensäure (APPA) hinein, in der gleichen Weise wie im APPA-Trypsin (Walter und Bode et al., Hoppe-Seylers Z. Physiol. Chem. 364 (1983), 949-959) und im APPA-Thrombin (Chen et al., Arch. Biochem. Biophys. 322 (1995), 198-203), wobei die Amidinogruppe der Carboxylatgruppe des Asp189 (am Boden der Tasche) gegenübersteht und zusätzliche Wasserstoffbrücken mit der Carbonylgruppe des Gly219 und dem Oy des Ser190 ausbildet und die Phenylgruppe eingeschlossen ist von den Peptidebenen 215 bis 216 und 190 bis 192. Die APPA-Pyruvatgruppe ragt aus der Tasche heraus, wobei sich die Carbonylgruppe unter Ausbildung eines tetraedrischen Übergangszustands (halbketal) an das Ser195 Oy anlagert. Unter der S1-Tasche (Standard-Orientierung) ragen, etwas getrennt durch die Gln192-Seitenkette, die Asp143-Seitenkette und (leicht nach links versetzt) die Asp147-Seitenkette aus der Moleküloberfläche heraus. Die resultierende negative Ladung ist ein möglicher zweiter Ankerpunkt für die basischen syntheti-

schen Tryptaseinhibitoren wie etwa Bis-benzamidine (Stürzebecher et al., Biol. Chem. Hoppe-Seyler 373 (1992) 1025-1030; Caughey et al., J. Pharmacol. Exp. Ther. 264 (1993), 676-682; Stubbs et al., J. Biol. Chem. 272 (1997), 19931-19937).

- 5 Die S2-Bindungsregion, nach oben begrenzt durch die flache Seite der His57-Imidazolgruppe und die Ala97-Seitenkette sowie (weiter außen) durch das Pro60A, ist etwas größer als im Trypsin. Die S3/S4-Region, auf der Indol-Gruppe des Trp215 und der Glu217-Seitenkette ruhend, ist dagegen nach oben durch die Gln98-Seitenkette desselben Monomers und die Tyr95-Phenolgruppe des Nachbarmonomers (D) in seiner Größe stark eingeschränkt. Den
- 10 linken Rand der S6-Region bilden die Seitenketten des Pro60A und des Asp60B des Nachbarmonomers (D). Die S1' und die S2'-Regionen sind sehr ähnlich wie im Trypsin. Die S3'-Region wird dagegen rechts durch das vorspringende Pro37A stärker eingeschränkt, und eine mit gestreckter Konformation gebundene Peptidkette würde kurz nach dem P5'-Rest an Reste des Nachbarmonomers (B) anstossen. Die Subregionen S2 bis S6 der Monomere A und D (sowie
- 15 der Monomere B und C) liegen in einer großen gemeinsamen Höhlung, die durch einen zusammenhängenden "Himmel", gebildet aus den vorspringenden 95er- 170er- und 60-er Peptidschleifen beider Monomeren, überwölbt wird und in der sich die S1 bis S4-Bindungsregionen der Monomeren A und D gegenüberstehen. Diese Geometrie, d.h. die räumliche Nähe der aktiven Zentren der Untereinheiten A und D (sowie der Unterheiten B und
- 20 C) im Tetramer ermöglicht die Entwicklung von bifunktionalen Inhibitoren mit zwei entsprechend räumlich getrennten funktionalen Inhibitorgruppen die an zwei verschiedene, insbesondere benachbarte aktive Stellen in unterschiedlichen Monomerunterheiten des Tetramers binden. Die Verbindungslinie zwischen den beiden etwa 23 Å voneinander entfernten Ser195 Oγ-Atomen (sowie zwischen den jeweiligen S1-, S2-, S3-, S4- oder S1'-Subregionen) verläuft durch
- 25 den freien Raum der stark negativ geladenen Höhle. Entsprechend ausgestaltete bifunktionelle Inhibitoren können deshalb beide katalytische Zentren durch diesen freien Raum miteinander verbinden.

- Die Erkenntnisse der Röntgenstrukturanalyse sind sehr hilfreich für die Entwicklung von
- 30 spezifischen, in ihrer Geometrie optimierten Tryptaseinhibitoren.

- Bei den erfindungsgemäßen Inhibitoren handelt es sich um bifunktionelle Inhibitoren, d.h. Inhibitoren mit zwei bindefähigen, funktionellen Gruppen. Diese Gruppen sind derart ausgestaltet, dass sie spezifisch an aktive Stellen der Tryptase binden können. Bevorzugt binden
- 35 die beiden funktionellen Gruppen des Inhibitors an aktive Stellen in verschiedenen Monomer-Untereinheiten des Tryptase-Tetramers.

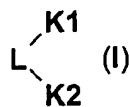
Die erfindungsgemäßen Inhibitoren sind zur Hemmung von humaner Tryptase geeignet. Unter

humaner Tryptase wird insbesondere das humane Enzym β -Tryptase mit der EC-Nr. 3.4.21.59 verstanden.

Die erfindungsgemäßen bifunktionellen Inhibitoren zeichnen sich dadurch aus, dass sie zwei
 5 Kopfgruppen, hierin K1 und K2 genannt, umfassen, die durch einen Linker L verbunden sind. Die Kopfgruppen K1 und K2 können gleich oder verschieden sein und umfassen jeweils eine Gruppe Q, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen kann. Erfindungswesentlich ist, dass der Linker L eine Konformation einnehmen kann, sodass die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen in einem Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen. Dieses räumliche Erfordernis
 10 ergibt sich aus der Raumstruktur der aktiven Zentren des Tryptasetetramers, wie sie durch Röntgenstruktur der Tryptase ermittelt wurde.

Weiterhin müssen die Ausmaße der Kopfgruppen und des Linkers der bifunktionellen Inhibitoren das Eindringen der Inhibitoren in einen Hohlraum mit den Dimensionen 52 Å x 32 Å x 40 Å
 15 (Tiefe) erlauben. Die enge Öffnung des zentralen Kanals, die, wie oben ausgeführt, durch Peptidschleifen weiterhin verengt ist, verhindert das Eindringen von voluminösen Inhibitoren. Aus diesem Grund sind für andere Serin-Proteinasen bekannte proteinartige Inhibitoren bei Tryptase nicht wirksam. Eine wesentliche Anforderung an wirksame Inhibitoren von Tryptase ist deshalb eine räumliche Struktur, die ein Eindringen der Inhibitoren in den von den vier Tryptase-
 20 Untereinheiten umschlossenen zentralen Hohlraum erlaubt. Es wurde überraschenderweise festgestellt, dass für die Struktur des Inhibitors nicht nur die unmittelbare Umgebung der Spezifitätstasche, sondern auch die räumliche Begrenzung hinsichtlich der durch die 4 Untereinheiten gebildeten und durch Peptidschleifen weiter verengten Pore von Bedeutung ist.

25 Die erfindungsgemäßen Inhibitoren weisen die Formel I



auf.

Die Kopfgruppen K1 und K2 der erfindungsgemäßen Inhibitoren umfassen bevorzugt Gruppen Q, die mit den Carboxylatgruppen von Asp189 von Tryptase Wechselwirkungen eingehen
 30 können. Asp189 steht für die Aminosäure Asparaginsäure in Position 189 der einzelnen Aminosäuresequenzen der monomeren Untereinheiten der Tryptase bei Anwendung einer Zählweise in Analogie zu der für die Aminosäuresequenz des Chymotrypsins bekannten Zählweise (vgl. Figur 4). Der Abstand der Carboxylgruppen der Asp189-Reste wird an der Röntgenstruktur der Tryptase gemessen als die kürzeste Distanz zwischen den jeweiligen
 35 Centroiden über die beiden endständigen Sauerstoffatome der Carboxylatgruppen. Die Abstände zwischen den Carboxylatgruppen der Asp189-Reste in den jeweiligen Untereinheiten

betragen zwischen A und B: $45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$, zwischen A und C $45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$, zwischen A und D $33 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$, zwischen B und C $33 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$, zwischen B und D $45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$ und zwischen C und D $45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$.

- 5 Die Asp189-Reste sind Bestandteile der Spezifitätstaschen der aktiven Zentren der jeweiligen Untereinheiten. Ein erfindungsgemäß bevorzugter Tryptaseinhibitor umfasst somit zwei gleiche oder verschiedene Kopfgruppen K1 und K2, die jeweils eine Gruppe Q umfassen, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen kann, wobei die Kopfgruppen durch einen Linker L verbunden sind, wobei der Linker L in der Lage ist, eine Konformation einzunehmen, die den beiden Gruppen Q der Kopfgruppen K1 und K2 das Eingehen einer Wechselwirkung mit den Carboxylatgruppen der Asp189-Reste in den Spezifitätstaschen von zwei verschiedenen Untereinheiten der Tryptase ermöglicht, wobei der Linker so dimensioniert ist, dass er in den, von den vier Untereinheiten umschlossenen, zentralen Hohlraum passt. Bevorzugt kann der Linker L eine Konformation einnehmen, sodass die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen in einem Abstand von 20 bis 45 \AA vorliegen, sodass eine Wechselwirkung mit den Carboxylatgruppen der Asp189-Reste der Untereinheiten A und D bzw. B und C möglich ist.

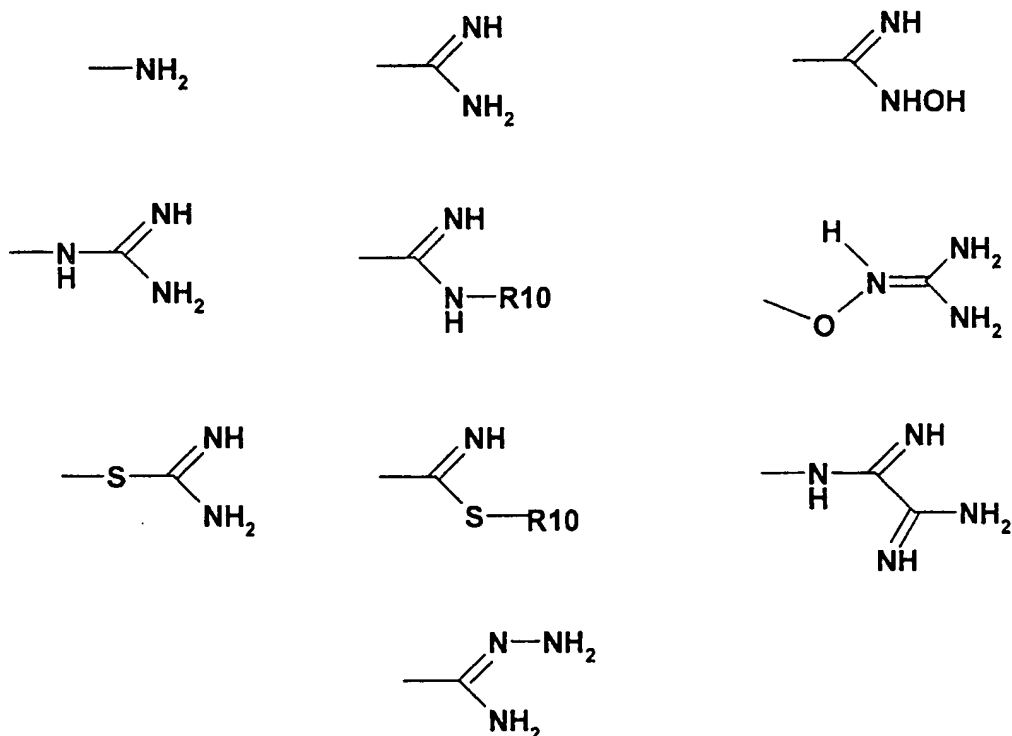
- Die Art der Wechselwirkung zwischen den Gruppen Q und den Carboxylatgruppen ist nicht beschränkt. Aufgrund der Bifunktionalität des Inhibitors wird auch bei geringen Wechselwirkungen eine hohe Bindungsaffinität und damit Spezifität des Inhibitors in Bezug auf Tryptase erzielt. Bevorzugt werden Gruppen Q verwendet, die mit Carboxylatgruppen, insbesondere mit den Carboxylatgruppen der Asp189-Reste in den Untereinheiten A und D bzw. B und C der Tryptase ionische Wechselwirkungen oder/und Wasserstoffbrücken-Wechselwirkungen eingehen können. Die Wechselwirkungen können dabei auch über ein oder mehrere Wassermoleküle vermittelt werden, wobei das Wassermolekül bzw. die Wassermoleküle zwischen der Kopfgruppe und der Carboxylatgruppe, insbesondere der Carboxylatgruppe des Asp189-Restes zu liegen kommen. Zur wirksamen Ausbildung der Wechselwirkungen, gegebenenfalls unter Einschluss eines oder mehrerer Wassermoleküle, weisen die Gruppen Q bevorzugt einen Abstand von etwa $2,5$ bis 5 \AA von einem oder beiden Carboxylat-Sauerstoffatomen, insbesondere den Carboxylat-Sauerstoffatomen von Asp189 in der S1-Tasche auf.

- Der Linker L umfasst bevorzugt aromatische, heterocyclische, alicyclische oder aliphatische Gruppen. Die Gesamtgröße des Linkers bzw. des bifunktionellen Inhibitors ist grundsätzlich nicht begrenzt. Wesentlich für die Funktion als Tryptase-Inhibitor ist jedoch, dass die Ausmaße der Kopfgruppen und des damit verbundenen Linkerteils es ermöglichen, dass die funktionellen Gruppen Q mit den aktiven Stellen der Tryptase in Wechselwirkung treten. Dies ist dann gewährleistet, wenn die Ausmaße der Kopfgruppen und des Linkers das Eindringen der Inhibitoren in den durch die vier Trypsasemonomereinheiten im Tetramer gebildeten Hohlraum

bzw. Kanal ermöglichen. Hierbei ist insbesondere auch die Beschränkung des Eingangs des Kanals auf etwa 52 Å x 32 Å zu berücksichtigen. Ein erfindungsgemäß bevorzugter Inhibitor umfasst deshalb Kopfgruppen und einen Linker, die das Eindringen der Inhibitoren durch einen Eingang mit den Dimensionen 52 Å x 32 Å, bevorzugt 50 Å x 30 Å und besonders bevorzugt 40 Å x 25 Å erlauben. Ein solches Eindringen ist dann gewährleistet, wenn die Dimensionen der Kopfgruppen und des Linkers gleich oder kleiner als die oben angegebenen Dimensionen sind. Es ist aber auch möglich, einen Inhibitor zu verwenden, dessen Kopfgruppen und Linker an sich größer sind und die aufgrund von Konformationsänderungen des Inhibitors oder/und des Kanals der tetrameren Tryptase dennoch ein Eindringen erlauben.

10

Die erfindungsgemäßen bifunktionellen Inhibitoren zeichnen sich dadurch aus, dass sie gleichzeitig an zwei katalytische Zentren, insbesondere von zwei verschiedenen Tryptase-monomereinheiten binden können. Als Gruppe Q sind dabei alle Gruppen verwendbar, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen können. Bevorzugt stellt die Gruppe Q eine basische Gruppe, insbesondere einen Protonendonator dar. Besonders bevorzugt ist die Gruppe Q, ausgewählt aus

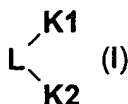


20 worin R₁₀ 1-4 C-Alkyl bedeutet. Erfindungsgemäß werden die funktionellen Gruppen Q, die Teil einer Kopfgruppe sein können oder eine Kopfgruppe selbst darstellen, durch geeignete Linker derart verbunden, dass die erfindungsgemäß beanspruchten Anforderungen an die Geometrie

erfüllt sind. Der Linker L kann dabei sowohl ein starres Strukturteil darstellen, sodass die Gruppen Q grundsätzlich im gewünschten Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen. Er kann aber auch ein flexibles Strukturteil darstellen, solange es nur möglich ist, dass der Linker L eine Konformation einnehmen kann, in der die Gruppen Q in dem gewünschten Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen.

Wie bereits erwähnt, ist die geometrische Anordnung der funktionellen Gruppen von grundsätzlicher Bedeutung für die Wirksamkeit ausgewählter Moleküle als bifunktionelle Inhibitoren von humaner Tryptase.

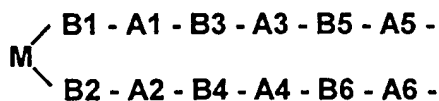
Ein erfindungsgemäß bevorzugter bifunktionseller Tryptase-Inhibitor weist daher die Formel I



auf,

wobei K1 und K2 gleich oder verschieden sind und jeweils eine Gruppe Q umfassen, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen kann,

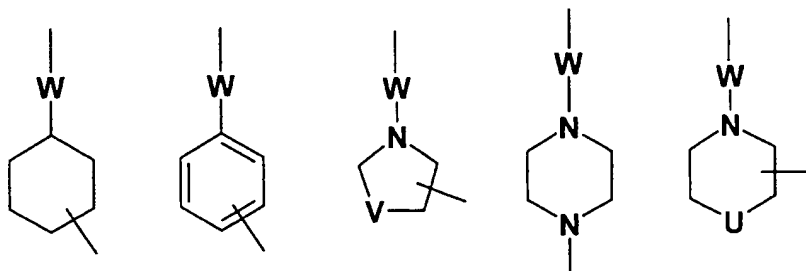
wobei der Linker L eine Konformation einnehmen kann, so daß die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen in einem Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen, wobei die Ausmaße der Kopfgruppen und des Linkers das Eindringen des Inhibitors in einen Hohlraum mit den Dimensionen 52 Å x 32 Å x 40 Å erlauben, und wobei L für



steht, worin

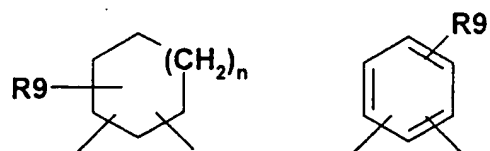
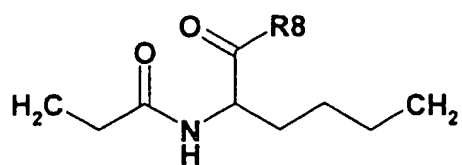
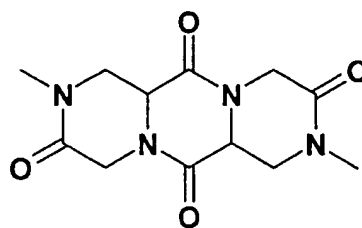
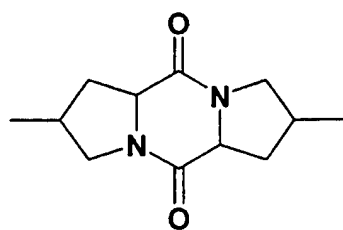
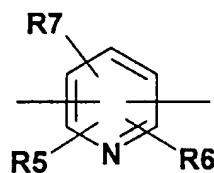
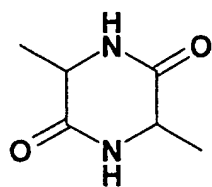
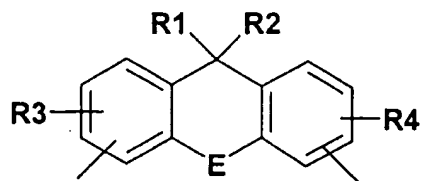
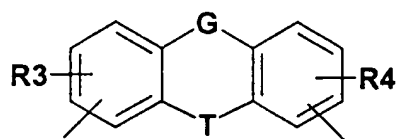
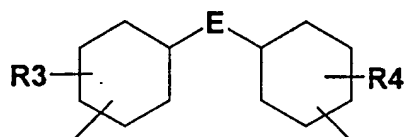
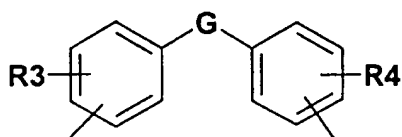
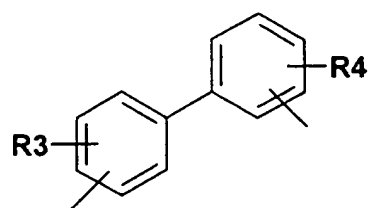
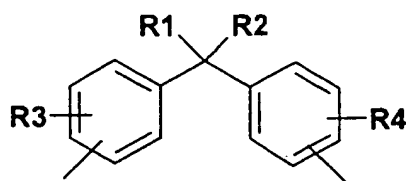
A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

- U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),
 V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen) bedeutet, und
 W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,
- 5 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
- M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



wobei

R1 und R2 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl oder Hydroxy bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind
5 -C(O)- bedeuten oder einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,

R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,

E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,

10 G -S-, -O- oder -S(O)₂- bedeutet,

T -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,

R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,

R7 Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, Phenyl oder Pyridyl bedeutet,

R8 1-4C-Alkoxy, N(R81)R82, Piperidino oder Morpholino bedeutet,

15 R81 und R82 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,

R9 Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeutet,

n 0, 1, 2 oder 3 bedeutet,

K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

20 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

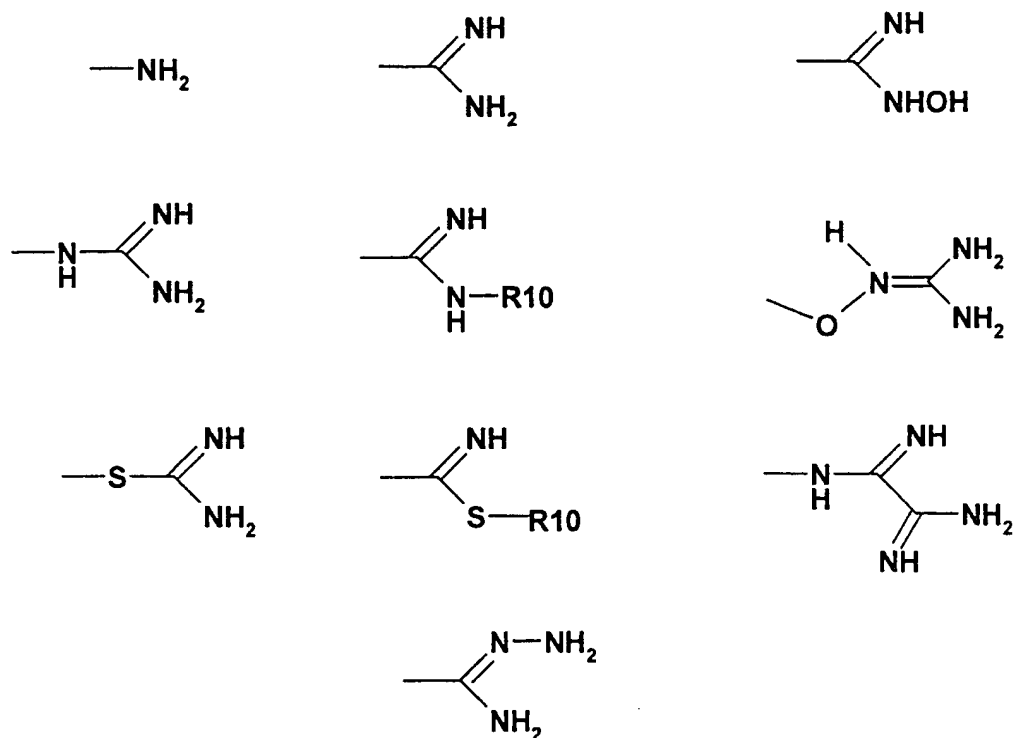
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

25 m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Heterocycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor oder Protonendonator fungieren kann, stehen,

Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxycarbonyl, 1-4C-Alkylcarbonyloxy, Carboxyl oder Aminocarbonyl substituiert sein kann,

die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,

wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

1-4C-Alkyl steht für geradkettige oder verzweigte Alkylreste mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen. Beispielsweise seien genannt der Butyl-, iso-Butyl-, sec.-Butyl-, tert.-Butyl-, Propyl-, Isopropyl-, Ethyl- und der Methylrest.

- 5 Als ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl seien beispielsweise der 2,2,3,3,3--Pentafluorpropyl-, der Perfluorethyl-, der 1,2,2-Trifluorethyl-, der 1,1,2,2-Tetrafluorethyl-, der 2,2,2-Trifluorethyl-, der Trifluormethyl- und der Difluormethylrest genannt.
- 10 Als 5- oder 6-gliedriger cyclischer Kohlenwasserstoff sei Cyclopentan oder Cyclohexan genannt.

1-4C-Alkoxy steht für Reste, die neben dem Sauerstoffatom einen geradkettigen oder verzweigten Alkylrest mit 1 bis 4 Kohlenstoffatomen enthalten. Beispielsweise seien genannt der

- 15 Butoxy-, iso-Butoxy-, sec.-Butoxy-, tert.-Butoxy-, Propoxy-, Isopropoxy- und bevorzugt der Ethoxy- und Methoxyrest.

1-4C-Alkylen steht für geradkettige oder verzweigte 1-4C-Alkylenreste, beispielsweise den Methylen- $[-CH_2-]$, Ethylen- $[-CH_2-CH_2-]$, Trimethylen- $[-CH_2-CH_2-CH_2-]$, Tetramethylen- $[-CH_2-CH_2-CH_2-CH_2-]$, 1,2-Dimethylethylen- $[-CH(CH_3)-CH(CH_3)-]$, 1,1-Dimethylethylen- $[-C(CH_3)_2-CH_2-]$, 2,2-Dimethylethylen- $[-CH_2-C(CH_3)_2-]$, Isopropyliden- $[-C(CH_3)_2-]$ oder den 1-Methylethylenrest $[-CH(CH_3)-CH_2-]$.

- 25 1-3C-Alkylen steht für geradkettige oder verzweigte 1-3C-Alkylenreste, beispielsweise den Methylen- $[-CH_2-]$, Ethylen- $[-CH_2-CH_2-]$, Trimethylen- $[-CH_2-CH_2-CH_2-]$, Isopropyliden- $[-C(CH_3)_2-]$ oder den 1-Methylethylenrest $[-CH(CH_3)-CH_2-]$.

Hat m die Bedeutung 0, so steht die Gruppe $-(C(O))_m-$ für eine Bindung.

- 30 Hat p die Bedeutung 0, so steht die Gruppe $-(C(O))_p-$ für eine Bindung.

Hat n die Bedeutung 0, so steht die Gruppe $-(CH_2)_n-$ für eine Bindung.

- 35 4-11C-Heteroaryl steht für einen – gewünschtenfalls substituierten – mono- oder bicyclischen aromatischen Kohlenwasserstoff, der 4 bis 11 C-Atome und mindestens ein Ringstickstoffatom enthält; zusätzlich können ein oder mehrere der Kohlenstoffatome durch Ringheteroatome ausgewählt aus der Gruppe O, N oder S ersetzt sein. Im Falle von Bicyclen ist minde-

stens einer der Ringe aromatisch. Beispielhaft genannt seien Pyrid-4-yl, Pyrid-3-yl, Pyrimidin-5-yl, Imidazol-1-yl und Benzimidazol-5-yl.

2-7C-Heterocycloalkyl steht für einen – gewünschtenfalls substituierten – monocyclischen gesättigten oder teilweise gesättigten Kohlenwasserstoff, der 2 bis 7 C-Atome und mindestens ein Ringstickstoffatom enthält; zusätzlich können ein oder mehrere Kohlenstoffatome durch Ringheteroatome ausgewählt aus der Gruppe O, N oder S ersetzt sein. Beispielhaft genannt seien Piperid-4-yl, Piperazin-1-yl, Pyrrolidin-2-yl, Pyrrolidin-3-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl und Morpholin-2-yl.

10

5-12C-Arylen steht für einen – gewünschtenfalls substituierten – divalenten mono- oder bicyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffrest, der 5 bis 12 C-Atome aufweist, wobei bei den bicyclischen aromatischen Kohlenwasserstoffresten mindestens einer der Ringe aromatisch ist. Die freien Valenzen können sich beide am aromatischen, beide am nichtaromatischen oder eine am aromatischen und eine am nichtaromatischen Ring befinden. Beispielhaft genannt seien 1,4-Phenylene, 1,3-Phenylene, 1,4-Naphthylene und 2,6-Naphthylene.

5-12C-Heteroarylen steht für einen Arylenrest, wie zuvor definiert, bei dem 1 bis 4 C-Atome durch Heteroatome ausgewählt aus der Gruppe O, N und S ersetzt sind. Beispielhaft genannt seien 2,5-Furylen, 2,5-Pyrrolylen, 4,2-Pyridylen, 5,2-Pyridylen, 2,5-Indolylen, 2,6-Indolylen, 3,5-Indolylen, 3,6-Indolylen, 3,5-Indazolylen, 3,6-Indazolylen, 2,5-Benzofuranylen, 2,6-Chinolinylen und 4,2-Thiazolylen.

3-8C-Cycloalkylen steht für einen – gewünschtenfalls substituierten – divalenten monocyclischen gesättigten oder teilweise gesättigten Kohlenwasserstoffrest, der 3 bis 8 C-Atome aufweist. Beispielhaft genannt seien der 1,3-Cyclopentylene-, der 1,3-Cyclohexylene- und bevorzugt der 1,4-Cyclohexylene-.

3-8C-Heterocycloalkylen steht für einen Cycloalkylenrest, wie zuvor definiert, bei dem 1 bis 3 C-Atome durch Heteroatome ausgewählt aus der Gruppe O, N und S ersetzt sind. Beispielhaft genannt seien der 1,4-Piperidinylen-, 1,4-Piperazinylen-, 2,5-Pyrrolidinylen-, 4,2-Imidazolidinylen- und bevorzugt der 4,1-Piperidinylenrest.

1-4C-Alkoxy-carbonyl steht für eine Carbonylgruppe, an die einer der vorstehend genannten 1-4C-Alkoxyreste gebunden ist. Beispielsweise seien der Methoxycarbonyl- ($\text{CH}_3\text{O}-\text{C}(\text{O})-$) und der Ethoxycarbonylrest ($\text{CH}_3\text{CH}_2\text{O}-\text{C}(\text{O})-$) genannt.

1-4C-Alkyl-carbonyloxy steht für eine Carbonyloxygruppe, an die einer der vorstehend

genannten 1-4C-Alkylreste gebunden ist. Beispielsweise sei der Acetoxyrest ($\text{CH}_3\text{C}(\text{O})-\text{O}-$) genannt.

5 Mehrere der unter M aufgeführten Gruppen besitzen an sich oder aufgrund ihrer Substitution ein oder mehrere Chiralitätszentren. Die Erfindung umfaßt daher sowohl alle reinen Enantiomeren und alle reinen Diastereomeren, als auch deren Gemische in jedem Mischungsverhältnis.

10 Die Gruppen Z1 bzw. Z2 befinden sich definitionsgemäß zwischen den Gruppen B9 und B11 (-B9-Z1-B11-) bzw. B10 und B12 (-B10-Z2-B12-). Entsprechend steht bei den beispielhaft genannten divalenten Gruppierungen (z. B. 2,6-Indolylen) die erste Zahl für die Verknüpfungsstelle mit der Gruppe B9 bzw. B10 und die zweite Zahl für die Verknüpfungsstelle mit der Gruppe B11 bzw. B12.

15 Als Salze kommen für Verbindungen der Formel I - je nach Substitution - alle Säureadditionssalze oder alle Salze mit Basen in Betracht. Besonders erwähnt seien die pharmakologisch verträglichen Salze der in der Galenik üblicherweise verwendeten anorganischen und organischen Säuren. Als solche eignen sich einerseits wasserlösliche und wasserunlösliche
20 Säureadditionssalze mit Säuren wie beispielsweise Salzsäure, Bromwasserstoffsäure, Phosphorsäure, Salpetersäure, Schwefelsäure, Essigsäure, Zitronensäure, D-Gluconsäure, Benzoesäure, 2-(4-Hydroxybenzoyl)-benzoesäure, Buttersäure, Sulfosalicylsäure, Maleinsäure, Laurinsäure, Äpfelsäure, Fumarsäure, Bernsteinsäure, Oxalsäure, Weinsäure, Embonsäure, Stearinsäure, Toluolsulfonsäure, Methansulfonsäure oder 3-Hydroxy-2-naphthoesäure, wobei die Säuren bei der Salzherstellung - je nachdem, ob es sich um eine ein-
25 oder mehrbasige Säure handelt und je nachdem, welches Salz gewünscht wird - im äquimolaren oder einem davon abweichenden Mengenverhältnis eingesetzt werden.

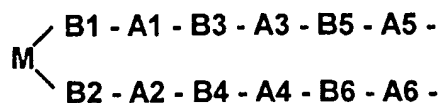
Andererseits kommen auch Salze mit Basen in Betracht. Als Beispiele für Salze mit Basen seien Alkali- (Lithium-, Natrium-, Kalium-) oder Calcium-, Aluminium-, Magnesium-, Titan-,
30 Ammonium-, Meglumin- oder Guanidiniumsalze erwähnt, wobei auch hier bei der Salzherstellung die Basen im äquimolaren oder einem davon abweichenden Mengenverhältnis eingesetzt werden.

Pharmakologisch unverträgliche Salze, die beispielsweise bei der Herstellung der erfindungsgemäßen Verbindungen im industriellen Maßstab als Verfahrensprodukte zunächst an-
35 fallen können, werden durch dem Fachmann bekannte Verfahren in pharmakologisch verträgliche Salze übergeführt.

Dem Fachmann ist bekannt, daß die erfindungsgemäßen Verbindungen als auch ihre Salze, wenn sie zum Beispiel in kristalliner Form isoliert werden, verschiedene Mengen an Lösungsmitteln enthalten können. Die Erfindung umfaßt daher auch alle Solvate und insbesondere alle Hydrate der Verbindungen der Formel I, sowie alle Solvate und insbesondere alle

5 Hydrate der Salze der Verbindungen der Formel I.

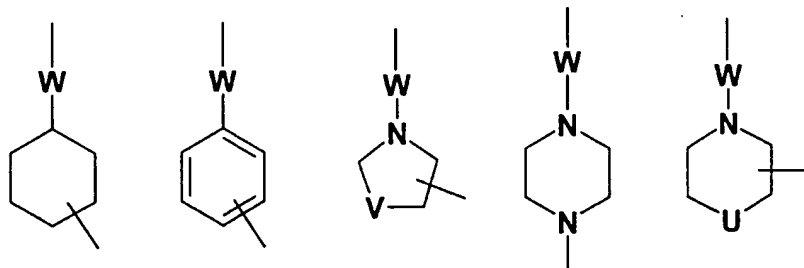
Eine Ausgestaltung (Ausgestaltung a) der erfindungsgemäßen Verbindungen der Formel I sind solche, worin L für



10 steht und

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

15 A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

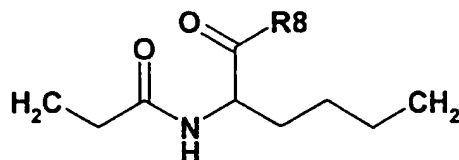
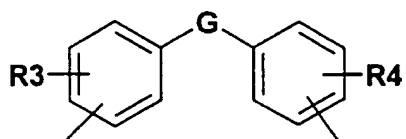
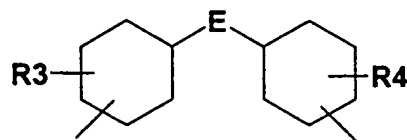
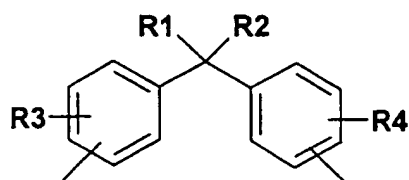
U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

20 W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



wobei

R1 und R2 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl oder Hydroxy bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind
5 -C(O)- bedeuten oder einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,

R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,

10 E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,

G -S-, -O- oder -S(O)₂- bedeutet,

R8 1-4C-Alkoxy, N(81)R82, Piperidino oder Morpholino bedeutet,

R81 und R82 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,

K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

15 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

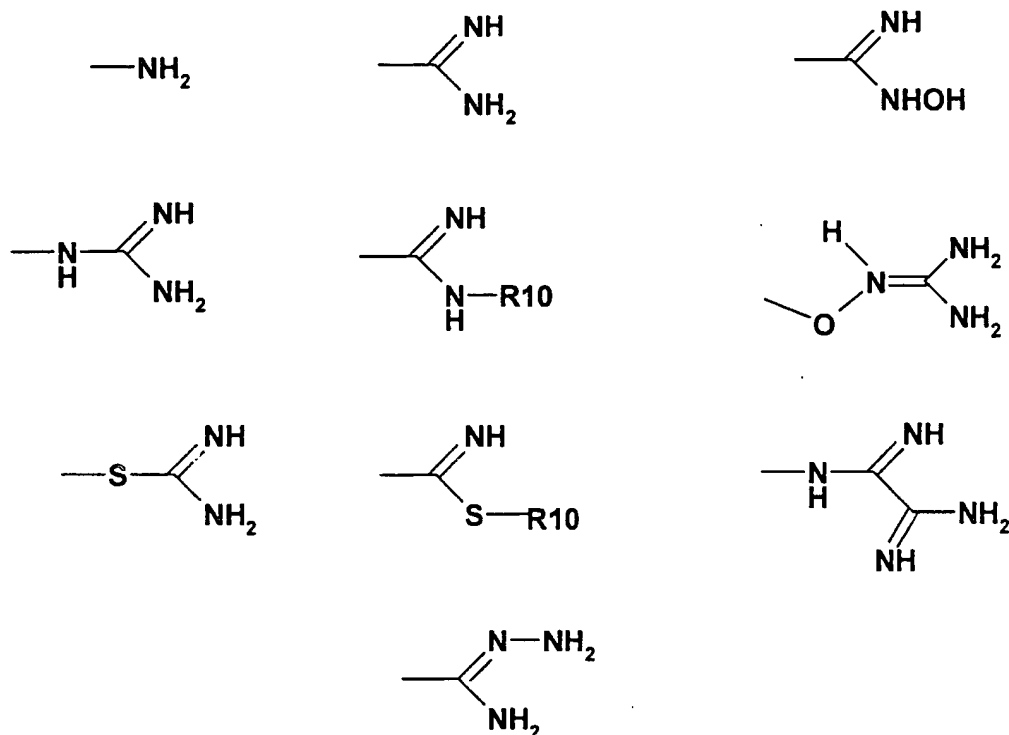
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

20 m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Heterocycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor oder Protonendonator fungieren kann, stehen,

Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxycarbonyl, 1-4C-Alkylcarbonyloxy, Carboxyl oder Aminocarbonyl substituiert sein kann,

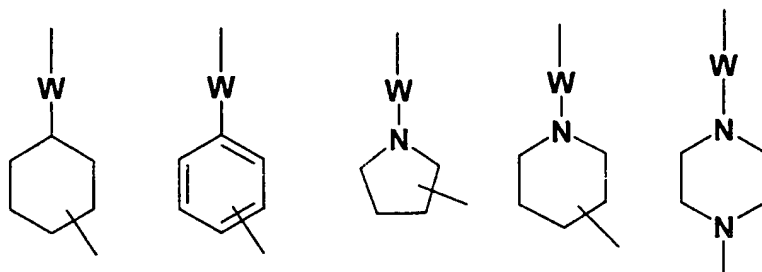
die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,

wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

Hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung a sind solche, worin

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und $-C(O)-$, $-NH-$, $-O-$ (Sauerstoff), $-C(O)-NH-$, $-NH-C(O)-$, $-O-C(O)-$, $-C(O)-O-$ oder eine Bindung bedeuten,

- 5 A3 und A4 gleich oder verschieden sind und $-C(O)-$, $-O-$, $-NH-$, $-O-C(O)-$, $-C(O)-O-$, $-C(O)-NH-$, $-NH-C(O)-$ oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe

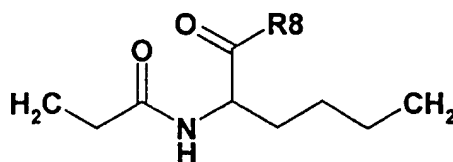
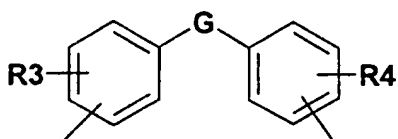
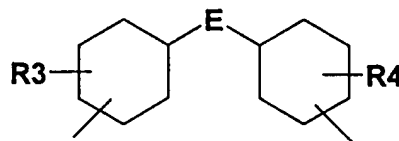
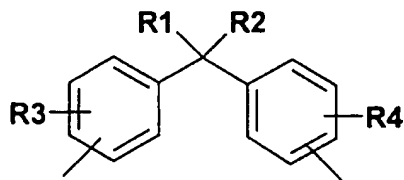


wobei

W die Gruppe $-C(O)-$ oder eine Bindung bedeutet,

- 10 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und $-C(O)-$, $-NH-$, $-O-$, $-C(O)-NH-$, $-NH-C(O)-$, $-O-C(O)-$, $-C(O)-O-$ oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



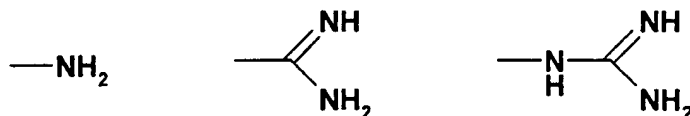
wobei

- 15 R1 und R2 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl oder Hydroxy bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind $-C(O)-$ bedeuten oder einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,

- 20 R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,

E $-CH_2-$, $-O-$ oder eine Bindung bedeutet,

- G -S-, -O- oder -S(O)₂- bedeutet,
- R8 1-4C-Alkoxy, N(R81)R82, Piperidino oder Morpholino bedeutet,
- R81 und R82 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
- K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
- 5 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
- B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder geradkettiges oder verzweigtes 1-4C-Alkyl bedeuten,
- B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkyl bedeuten,
- 10 m 0 oder 1 bedeutet,
- p 0 oder 1 bedeutet,
- X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind

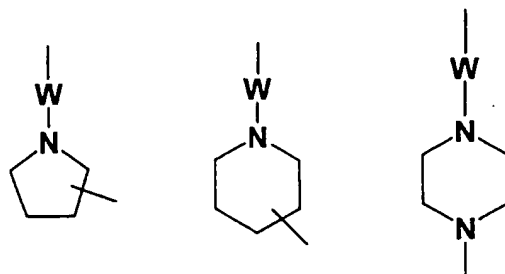


- Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Piperid-4-yl, Piperid-3-yl, Piperazin-1-yl, Piperazin-2-yl, Morpholin-2-yl, Pyrrolidin-2-yl, Pyrrolidin-3-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, 2-Imidazolin-3-yl, 2-Imidazolin-2-yl, Imidazol-1-yl, Imidazol-2-yl, Imidazol-4-yl, 5-Methyl-Imidazol-4-yl, Pyrid-4-yl, Pyrid-3-yl, Pyridazin-4-yl, Pyrimidin-5-yl, Pyrimidin-4-yl, Indol-3-yl, Benzimidazol-4-yl oder Benzimidazol-5-yl bedeuten,
- 15
- Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylen, 1,3-Phenylen, 1,4-Naphthylen, 2,6-Naphthylen, 1,4-Cyclohexylen, 1,3-Cyclohexylen, 1,3-Cyclopentylen, 1,4-Piperazinylen, 4,1-Piperidinylen, 1,4-Piperidinylen, 2,5-Pyrrolidinylen, 4,2-Imidazolidinylen, 2,5-Furylen, 2,5-Pyrrolylen, 4,2-Pyridylen, 5,2-Pyridylen, 6-Methyl-5,2-pyridinylen, 2,5-Indolylen, 2,6-Indolylen, 3,5-Indolylen, 3,6-Indolylen, 3,5-Indazolylen, 3,6-Indazolylen, 2,6-Chinolinylen, 2,5-Benzofuranylen oder 4,2-Thiazolylen bedeuten,
- 20
- die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer
- 25
- Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome oder Carbonylgruppen kommen würde.
- 30

Besonders hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung a sind solche, worin

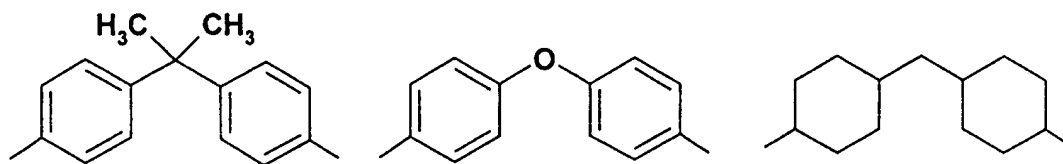
A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -O- (Sauerstoff) oder -NH-C(O)- bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-NH- bedeuten oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

- 5 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten,
M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



- 10 K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder -CH₂- (Methylen) bedeuten,
B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder
15 1-2C-Alkylen bedeuten,
m 0 oder 1 bedeutet,
p 0 oder 1 bedeutet,
X1 und X2 gleich oder verschieden sind und Amino, Amidino oder Guanidino bedeuten,
Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylen, 1,3-Phenylen, 1,4-Cyclohexylen
20 oder 1,4-Piperazinylen bedeuten,

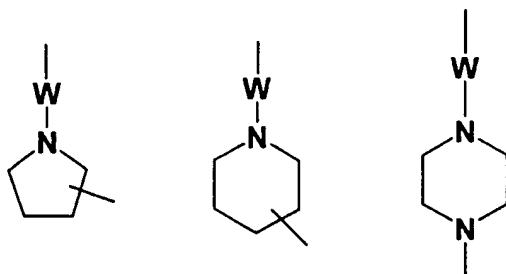
die Salze dieser Verbindungen, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome oder zweier Carbonylgruppen kommen würde.

25

Bevorzugte Verbindungen der Ausgestaltung a sind solche, worin

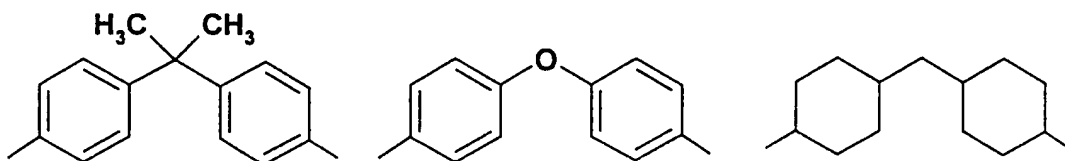
A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -O- (Sauerstoff) oder -NH-C(O)- bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-NH- bedeuten oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

- 5 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten,
M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen

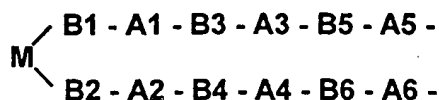


- K1 -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
10 K2 -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder -CH₂- (Methylen) bedeuten,
B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder -CH₂- (Methylen) bedeuten,
15 m 0 oder 1 bedeutet,
p 0 oder 1 bedeutet,
X1 und X2 gleich oder verschieden sind und Amino, Amidino oder Guanidino bedeuten,
Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylen, 1,3-Phenylen, 1,4-Cyclohexylen oder 1,4-Piperazinylen bedeuten,
20 die Salze dieser Verbindungen, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome oder zweier Carbonylgruppen kommen würde.
25 Besonders bevorzugte Verbindungen der Ausgestaltung a sind Bis{4-[4-(4-aminomethyl)cyclohexanoyl]piperazin-1-yl}carbonyl-4,4'-diamino-diphenylether, Bis{4-[(3-aminomethyl)-benzoyl]piperazin-1-yl}carbonyl-4,4'-diamino-diphenylether, Di{4-[4-(4-aminomethyl)cyclohexanoyl]-

amino]piperidin-1-yl-carbamoyl)cyclohexylmethan, 2,2-Bis-[4-(4-guanidiny]benzylamino)-
carbonylmethoxyphenyl]propan, 2,2-Bis-[4-(10-amino-3,6-diaza-2,5-
dioxodecyloxy)phenyl]propan und 2,2-Bis-[4-[4-(4-aminomethylbenzylcarbamoyl)-1-
piperaziny]carbonyloxy]phenyl]propan, sowie die Salze dieser Verbindungen.

5

Eine weitere Ausgestaltung (Ausgestaltung b) der erfindungsgemäßen Verbindungen der
Formel I sind solche, worin L für

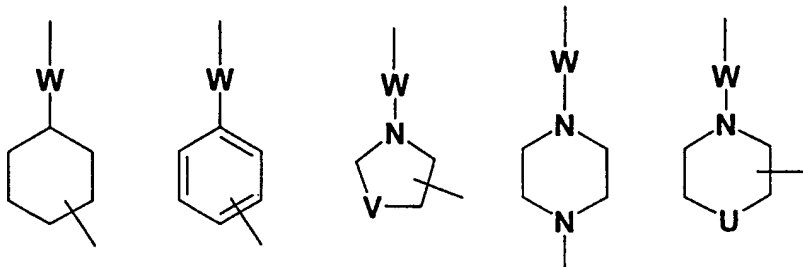


steht und

- 10 A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel),
-S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder ei-
ne Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-,
-C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind

- 15 aus der Gruppe



wobei

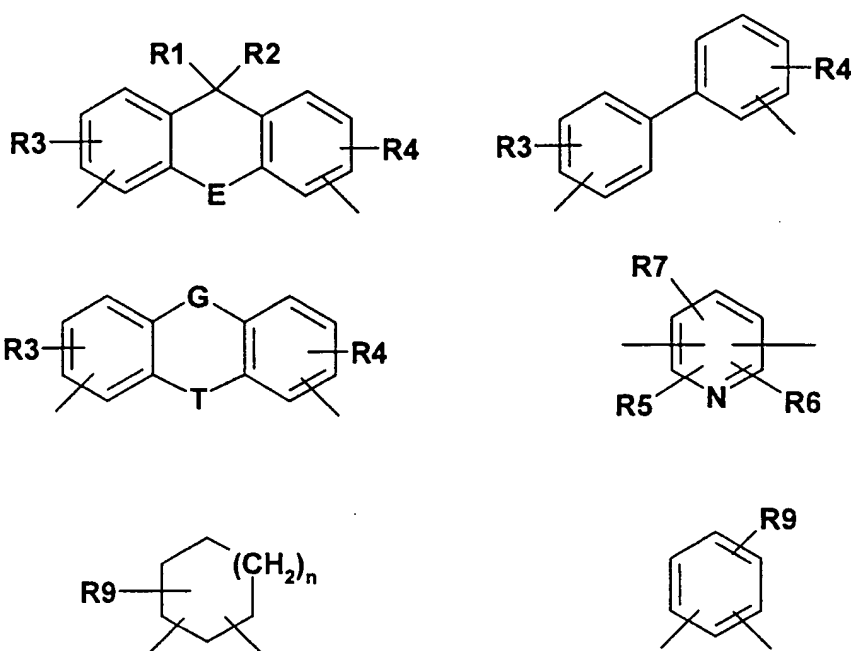
U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

- 20 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-,
-O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



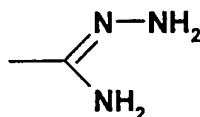
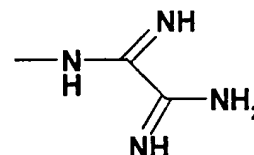
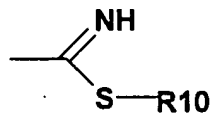
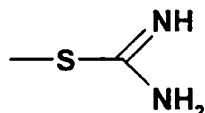
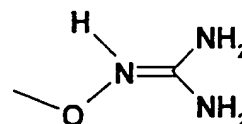
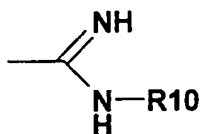
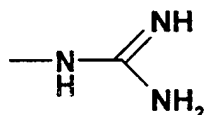
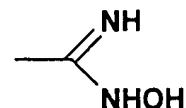
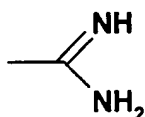
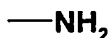
wobei

- R1 und R2 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl oder Hydroxy bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind
- 5 -C(O)- bedeuten oder einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,
- R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
- 10 E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
- G -S-, -O- oder -S(O)₂- bedeutet,
- T -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
- R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
- R7 Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, Phenyl oder Pyridyl bedeutet,
- 15 R9 Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeutet,
- n 0, 1, 2 oder 3 bedeutet,
- K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
- K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
- 20 B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,
- B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



5 wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Heterocycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor oder Protonendonator fungieren kann, stehen,

10 Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxy-carbonyl, 1-4C-Alkyl-carbonyloxy, Carboxyl oder Aminocar-

15

bonyl substituiert sein kann,

die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,

wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der

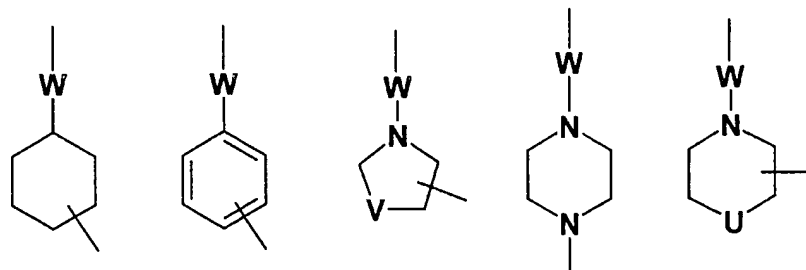
20 Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

Hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind einerseits solche, worin

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine

5 Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

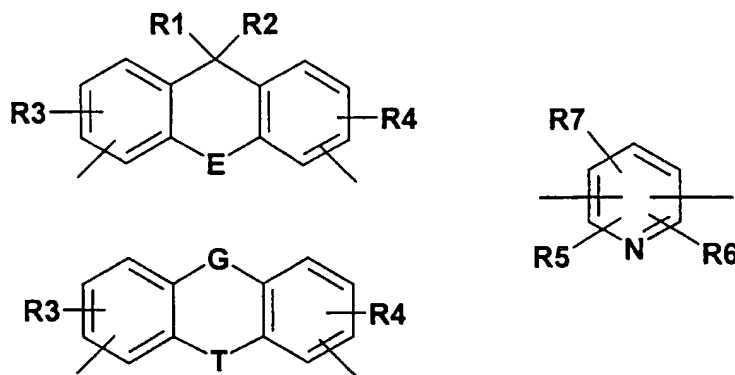
10 U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

15 M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



wobei

R1 und R2 gleich oder verschieden sind und ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes

20 1-4C-Alkyl bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,

R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,

E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,

G -S(O)₂- bedeutet,

5 T -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,

R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,

R7 Pyridyl bedeutet,

K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

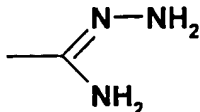
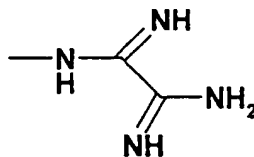
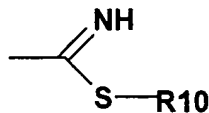
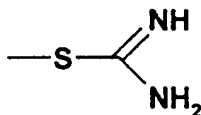
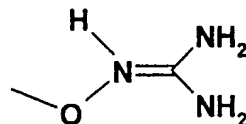
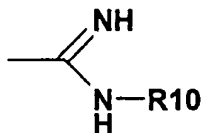
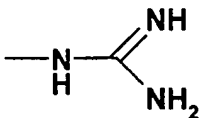
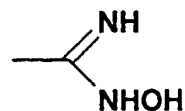
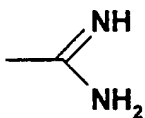
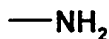
10 B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

m 0 oder 1 bedeutet,

15 p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Heterocycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor oder Protonendonator fungieren kann, stehen,

5 Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

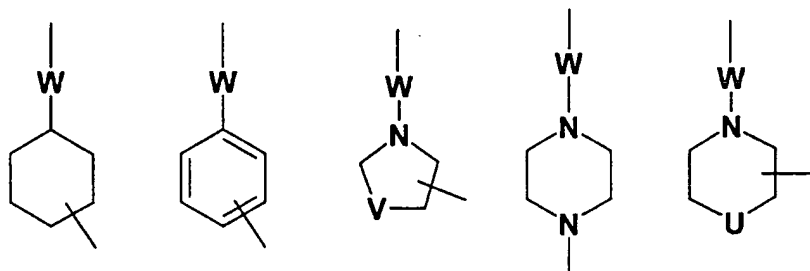
wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxycarbonyl, 1-4C-Alkylcarbonyloxy, Carboxyl oder Aminocar-

10 bonyl substituiert sein kann,
die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer
15 Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

Hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind andererseits solche, worin

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel),
20 -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



25 wobei

U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

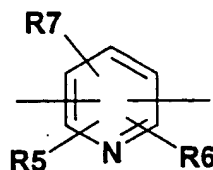
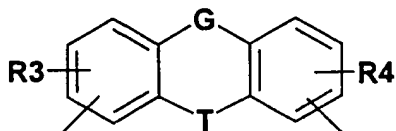
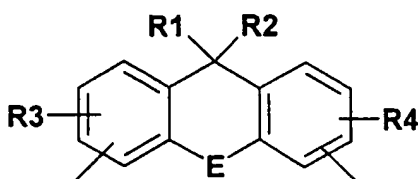
V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-,

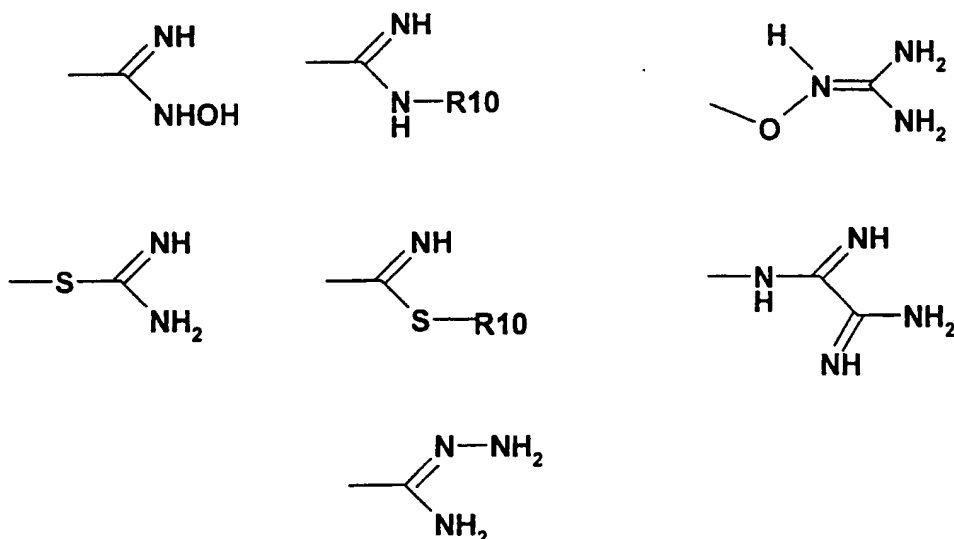
30 -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



wobei

- 5 R1 und R2 gleich oder verschieden sind und 1-4C-Alkyl bedeuten oder gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms, an das sie gebunden sind Carbonyl bedeuten,
 R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
 E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
 10 G -O-(Sauerstoff) oder -S- (Schwefel) bedeutet,
 T -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
 R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
 R7 Wasserstoff, 1-4C-Alkyl oder Phenyl bedeutet,
 K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
 15 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
 B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,
 B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,
 20 m 0 oder 1 bedeutet,
 p 0 oder 1 bedeutet,
 X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Pyrrolidin-2-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, Pyridazin-4-yl, Indol-3-yl oder Morpholin-2-yl bedeuten,

- 5 Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxy-carbonyl, 1-4C-Alkyl-carbonyloxy, Carboxyl oder Aminocar-

- 10 bonyl substituiert sein kann,

die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,

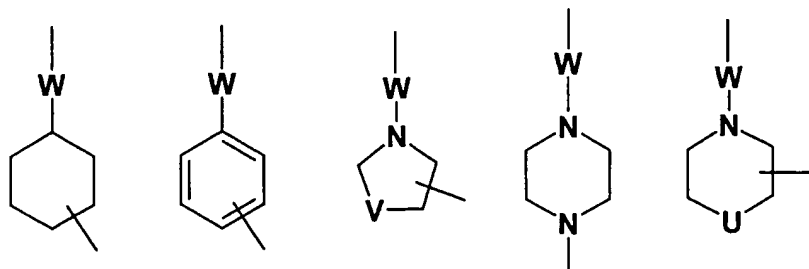
wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der

- 15 Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

- 20 Hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind weiterhin solche, worin

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)₂-, -NH-S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



5 wobei

U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

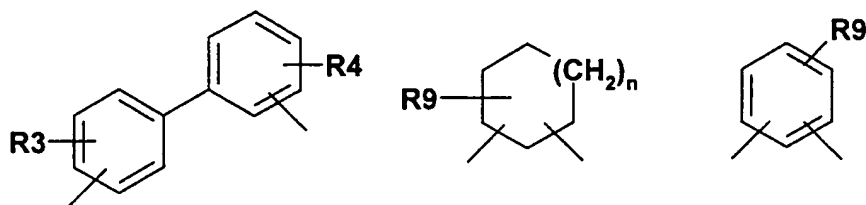
V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-,

10 -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



wobei

15 R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,

R9 Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeutet,

n 0, 1, 2 oder 3 bedeutet,

20 K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

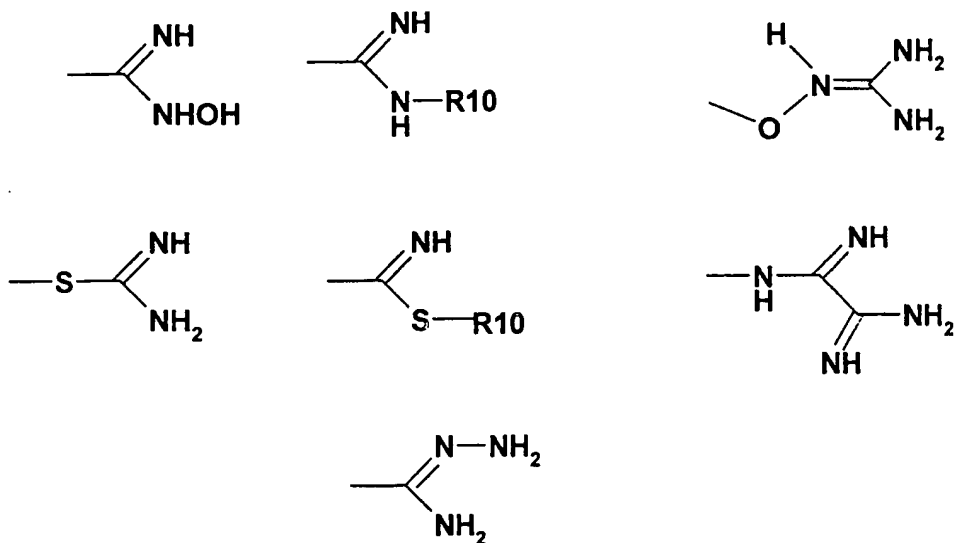
B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

25

m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

5 R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Pyrrolidin-2-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, Pyridazin-4-yl, Indol-3-yl oder Morpholin-2-yl bedeuten,

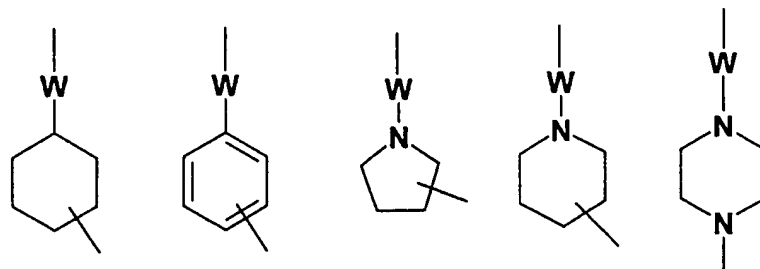
Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

10 wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxy-carbonyl, 1-4C-Alkyl-carbonyloxy, Carboxyl oder Aminocarbonyl substituiert sein kann,

15 die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier
20 Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

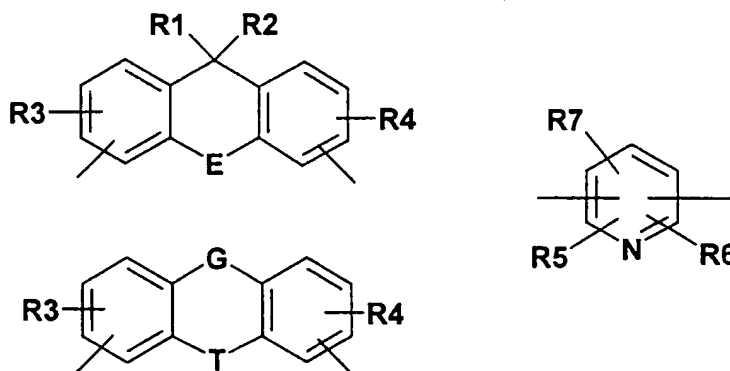
Besonders hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind einerseits solche, worin A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -O-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

- 5 W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,
 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
 M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



10

wobei

- R1 und R2 gleich oder verschieden sind und ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,
 15 R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
 E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
 G -S(O)₂- bedeutet,
 20 T -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
 R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
 R7 Pyridyl bedeutet,

K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
 B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen
 bedeuten,

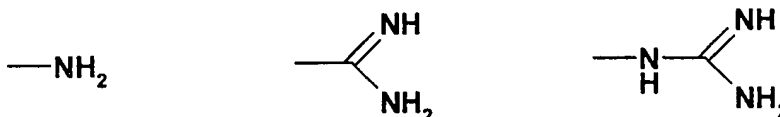
5 B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind

10



Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Piperid-4-yl, Piperid-3-yl, Piperazin-1-yl,
 Piperazin-2-yl, Morpholin-2-yl, Pyrrolidin-2-yl, Pyrrolidin-3-yl, Imidazolidin-1-yl, Imida-
 zolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, 2-Imidazolin-3-yl, 2-Imidazolin-2-yl, Imidazol-1-yl, Imida-
 zol-2-yl, Imidazol-4-yl, 5-Methyl-Imidazol-4-yl, Pyrid-4-yl, Pyrid-3-yl, Pyridazin-4-yl, Py-
 rimidin-5-yl, Pyrimidin-4-yl, Indol-3-yl, Benzimidazol-4-yl oder Benzimidazol-5-yl be-
 15 deuten,

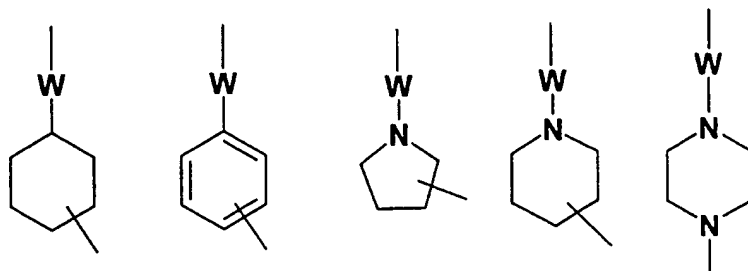
Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylene, 1,3-Phenylene, 1,4-Naphthylene,
 2,6-Naphthylene, 1,4-Cyclohexylene, 1,3-Cyclohexylene, 1,3-Cyclopentylene, 1,4-Pipera-
 zinylen, 4,1-Piperidinylen, 1,4-Piperidinylen, 2,5-Pyrrolidinylen, 4,2-Imidazolidinylen,
 2,5-Furylen, 2,5-Pyrrolylen, 4,2-Pyridylen, 5,2-Pyridylen, 6-Methyl-5,2-pyridinylen,
 2,5-Indolylen, 2,6-Indolylen, 3,5-Indolylen, 3,6-Indolylen, 3,5-Indazolylen,
 3,6-Indazolylen, 2,6-Chinolinylen, 2,5-Benzofuranylen oder 4,2-Thiazolylen bedeuten,
 die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden
 25 Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,
 wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der
 Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer
 Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome oder
 zweier Carbonylgruppen kommen würde.

30

Besonders hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind andererseits Verbindungen der Formel I worin

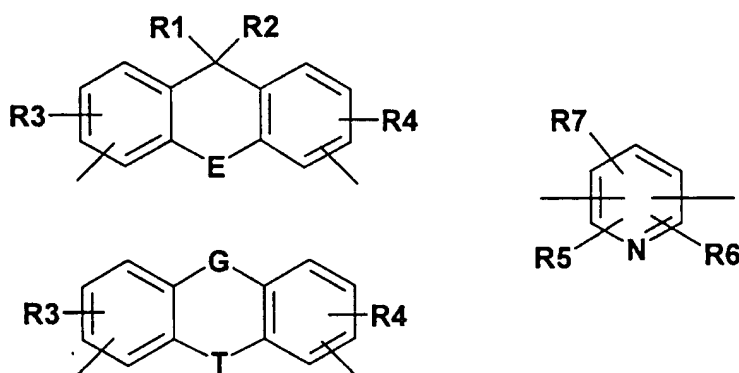
A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -C(O)-NH-,
 -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -O-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

- 5 W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,
 A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
 M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



10

wobei

- R1 und R2 gleich oder verschieden sind und 1-4C-Alkyl bedeuten oder gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms, an das sie gebunden sind Carbonyl bedeuten,
 R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche
 15 oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
 E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
 G -O- (Sauerstoff) oder -S- (Schwefel) bedeutet,
 T -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
 R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
 20 R7 Wasserstoff, 1-4C-Alkyl oder Phenyl bedeutet,
 K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

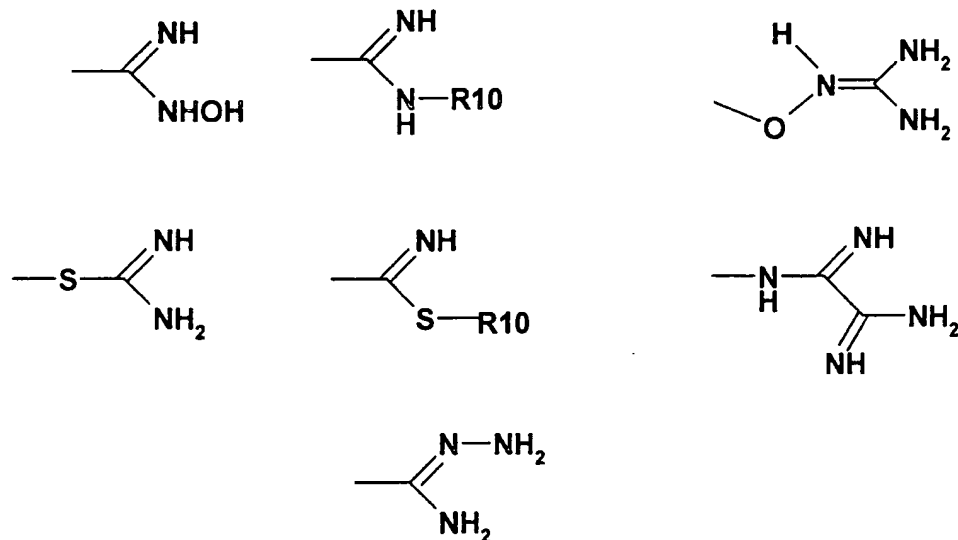
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

5 m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

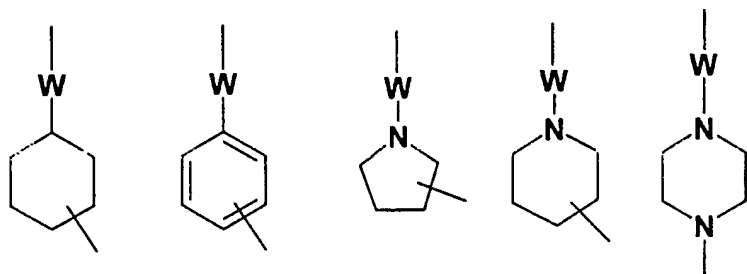
10 R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Pyrrolidin-2-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, Pyridazin-4-yl, Indol-3-yl oder Morpholin-2-yl bedeuten,

Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylen, 1,3-Phenylen, 1,4-Naphthylen, 2,6-Naphthylen, 1,4-Cyclohexylen, 1,3-Cyclohexylen, 1,3-Cyclopentylen, 1,4-Piperazinylen, 4,1-Piperidinylen, 1,4-Piperidinylen, 2,5-Pyrrolidinylen, 4,2-Imidazolidinylen, 2,5-Furylen, 2,5-Pyrrolylen, 4,2-Pyridylen, 5,2-Pyridylen, 6-Methyl-5,2-pyridinylen, 2,5-Indolylen, 2,6-Indolylen, 3,5-Indolylen, 3,6-Indolylen, 3,5-Indazolylen, 3,6-Indazolylen, 2,6-Chinolinylen, 2,5-Benzofuranylen oder 4,2-Thiazolylen bedeuten,

20 die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome oder
25 zweier Carbonylgruppen kommen würde.

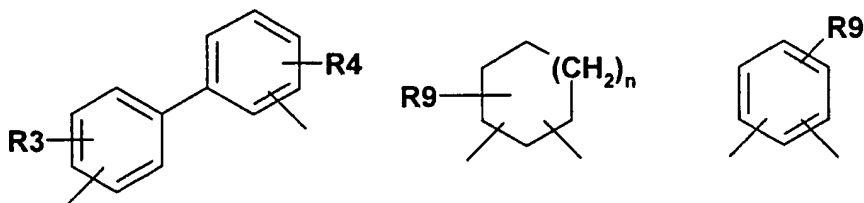
- Besonders hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind weiterhin solche, worin A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
- A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -O-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

- A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
- M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen

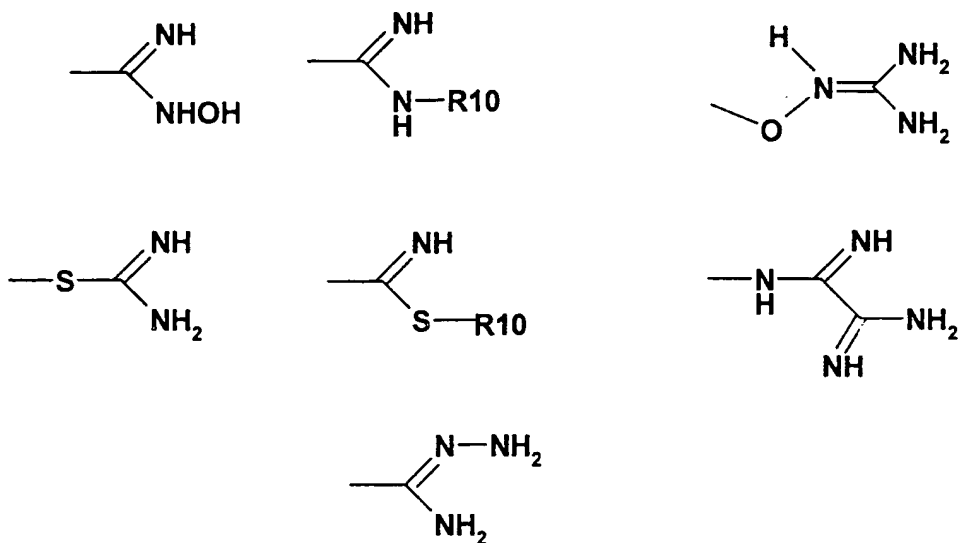


wobei

- R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
- R9 Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeutet,
- n 0, 1, 2 oder 3 bedeutet,
- K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
- K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
- B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,
- B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,
- m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

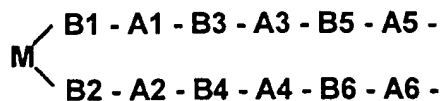
- 5 R10 1-4C-Alkyl bedeutet,
 Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Pyrrolidin-2-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, Pyridazin-4-yl, Indol-3-yl oder Morpholin-2-yl bedeuten,
 Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylene, 1,3-Phenylene, 1,4-Naphthylene, 2,6-Naphthylene, 1,4-Cyclohexylene, 1,3-Cyclohexylene, 1,3-Cyclopentylene, 1,4-Piperazine, 4,1-Piperidine, 1,4-Piperidine, 2,5-Pyrrolidine, 4,2-Imidazolidine, 2,5-Furylene, 2,5-Pyrrolylene, 4,2-Pyridylene, 5,2-Pyridylene, 6-Methyl-5,2-pyridylene, 2,5-Indolyne, 2,6-Indolyne, 3,5-Indolyne, 3,6-Indolyne, 3,5-Indazole, 3,6-Indazole, 2,6-Chinoline, 2,5-Benzofurane oder 4,2-Thiazole bedeuten,
 10 die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier
 20 Carbonylgruppen kommen würde.

Besonders hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung b sind außerdem Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid], Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(trans-4-aminomethylcyclohexanoyl)-1-piperazid], 2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-[4-(3-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid], Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-amino-

25

methyl-benzoylamino)-1-piperidid] und Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(4-aminomethyl-cyclohexylcarbonylamino)-1-piperidid], sowie die Salze dieser Verbindungen.

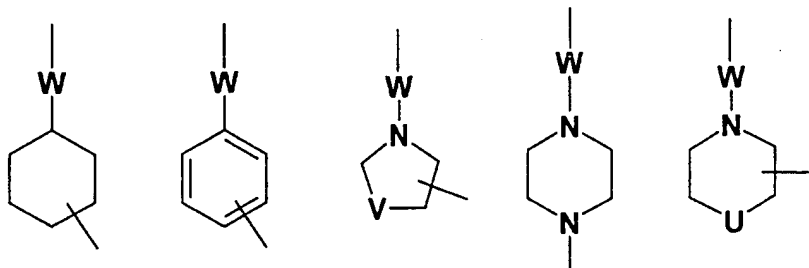
Eine weitere Ausgestaltung (Ausgestaltung c) der Verbindungen der Formel I sind solche,
5 worin L für



steht und

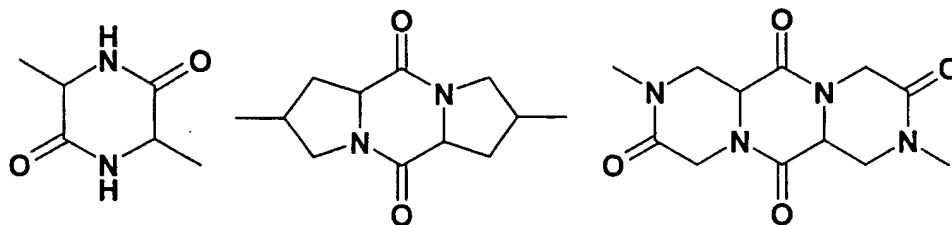
A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel),
-S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder ei-
10 ne Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-,
-C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind
aus der Gruppe



wobei

- 15 U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),
V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und
W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,
A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-,
-O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
20 M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

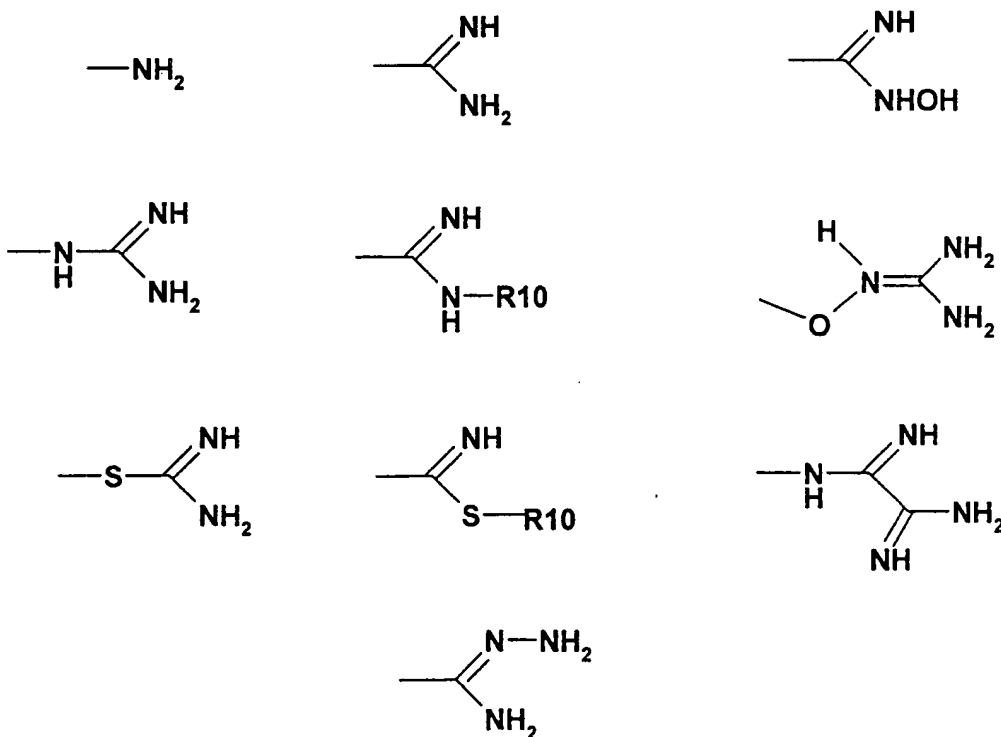
K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen
bedeuten,

B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Al-
kylen bedeuten,

m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



10 wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Hetero-
cycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor
oder Protonendonator fungieren kann, stehen,

15 Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cy-
cloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

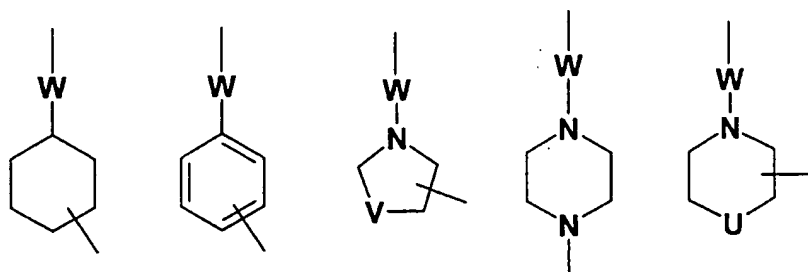
wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder
Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten aus-
gewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl,
20 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxy-carbonyl, 1-4C-Alkyl-carbonyloxy, Carboxyl oder Aminocar-
bonyl substituiert sein kann,

- die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer
- 5 Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

Hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung c sind solche, worin

- A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel),
- 10 -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



- 15 wobei

U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

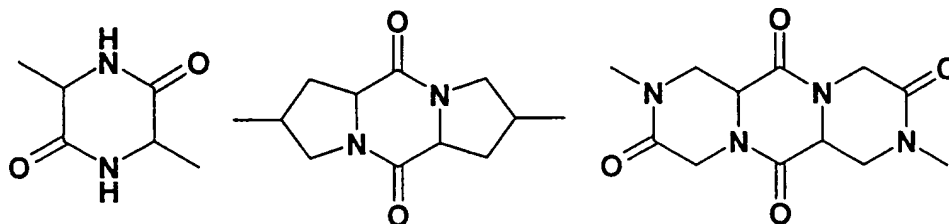
V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-,

- 20 -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

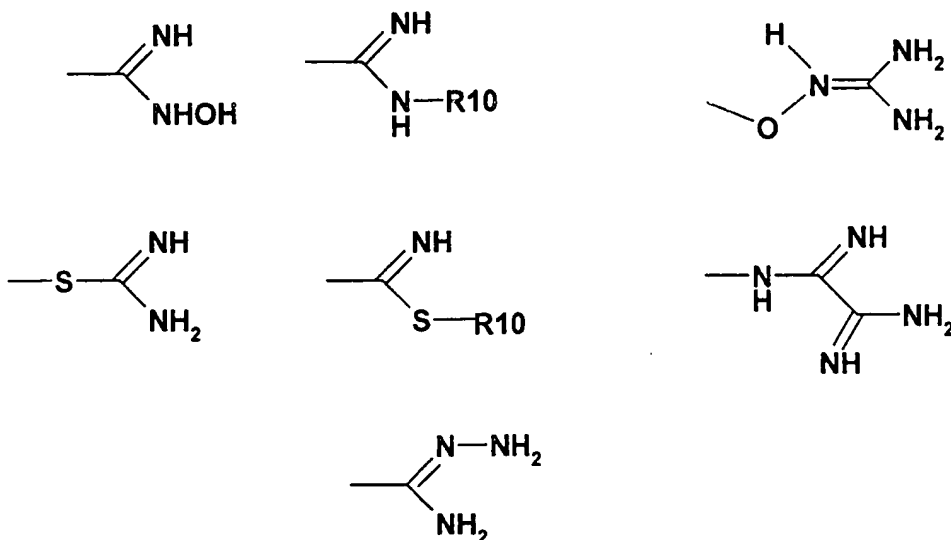
B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,

5 m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

10 R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Pyrrolidin-2-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, Pyridazin-4-yl, Indol-3-yl oder Morpholin-2-yl bedeuten,

Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

15 wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxycarbonyl, 1-4C-Alkylcarbonyloxy, Carboxyl oder Aminocarbonyl substituiert sein kann,

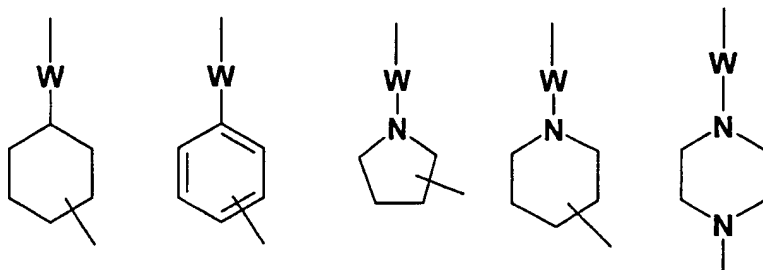
20 die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze, wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

25

Besonders hervorzuhebende Verbindungen der Ausgestaltung c sind solche, worin

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

- 5 A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -O-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe

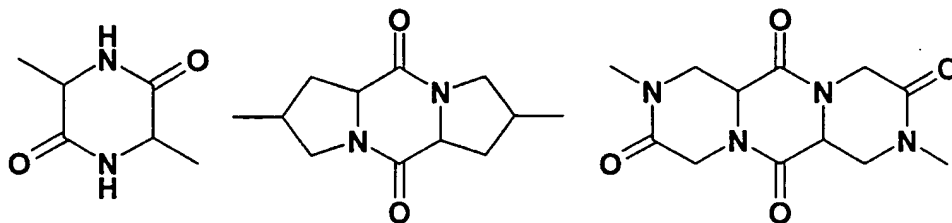


wobei

- 10 W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen



- 15 K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,

K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,

B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,

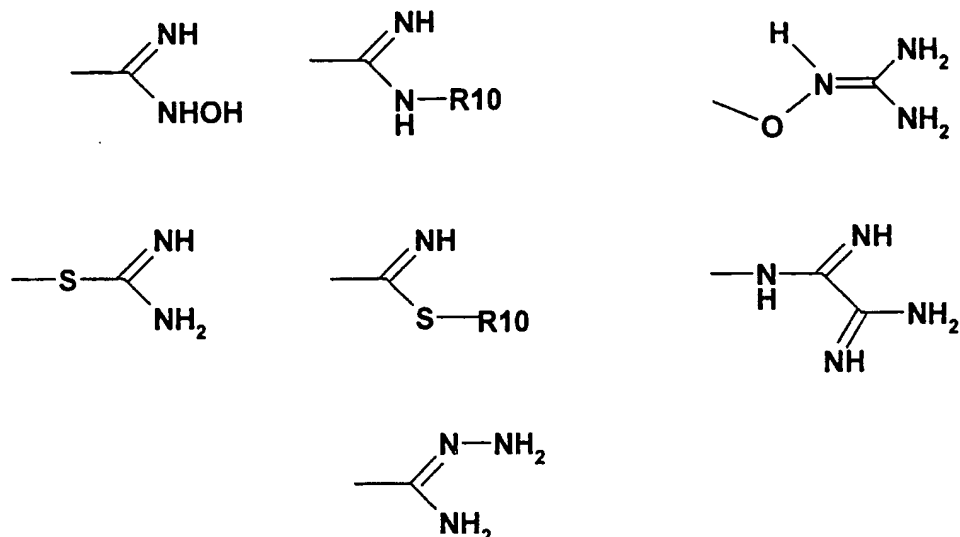
B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Al-

- 20 kylene bedeuten,

m 0 oder 1 bedeutet,

p 0 oder 1 bedeutet,

X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und Pyrrolidin-2-yl, Imidazolidin-1-yl, Imidazolidin-2-yl, Imidazolidin-4-yl, Pyridazin-4-yl, Indol-3-yl oder Morpholin-2-yl bedeuten,

- 5 Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 1,4-Phenylen, 1,3-Phenylen, 1,4-Naphthylen, 2,6-Naphthylen, 1,4-Cyclohexylen, 1,3-Cyclohexylen, 1,3-Cyclopentylen, 1,4-Piperazinylen, 4,1-Piperidinylen, 1,4-Piperidinylen, 2,5-Pyrrolidinylen, 4,2-Imidazolidinylen, 2,5-Furylen, 2,5-Pyrrolylen, 4,2-Pyridylen, 5,2-Pyridylen, 6-Methyl-5,2-pyridinylen, 2,5-Indolylen, 2,6-Indolylen, 3,5-Indolylen, 3,6-Indolylen, 3,5-Indazolylen, 3,6-Indazol-

- 10 ylen, 2,6-Chinolinylen, 2,5-Benzofuranylen oder 4,2-Thiazolylen bedeuten,
die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,
wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer
15 Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome oder zweier Carbonylgruppen kommen würde.

Neben der Wechselwirkung mit Asp189 können die Gruppen Q auch mit den funktionellen Gruppen einer oder mehrerer der Aminosäuren Carbonyl-Gly219, Carbonyl-Ser190 oder/und
20 Tyr228 der jeweiligen Tryptase-Untereinheit direkt oder unter Vermittlung von Wassermolekülen Wechselwirkungen eingehen.

- Die Kopfgruppen K1 und/oder K2 können weitere funktionelle Gruppen aufweisen, die direkt oder unter Vermittlung von Wassermolekülen Wechselwirkungen zu funktionellen Gruppen
25 einer oder mehrerer der Aminosäuren Ser195 Oγ, Ser190 Oγ, Carbonyl-Ser190, Carbonyl-Gly216, Carbonyl-Gly219, NH-Gly219 und/oder Ser214 der jeweiligen Tryptase-Untereinheit

aufweisen. Die genauen Abstände zwischen den Bindungsstellen der Gruppen einer Tryptase-Untereinheit können den Kristallstrukturdaten entnommen werden.

Weiterhin können die Kopfgruppen K1 und/oder K2 bevorzugt eine geladene Gruppe umfassen,
5 die Wasserstoff-Brückenwechselwirkungen mit Gln192 sowie elektrostatische Wechselwirkungen mit den Carboxylatgruppen von Asp143 oder/und Asp147 der Tryptase eingehen können.

Weiterhin kann der erfindungsgemäße bifunktionelle Inhibitor in den Kopfgruppen K1 und/oder K2 eine Gruppe aufweisen, die mit der S2-Region Wechselwirkungen eingehen kann.

10

Die Kopfgruppen K1 und/oder K2 können weiterhin eine Gruppe, bevorzugt eine kurze Gruppe, aufweisen, die eine Wechselwirkung mit den polaren oder unpolaren Seitenketten von Thr96, Ala97 und Gln98 und mit Tyr95 und Thr96 und Gln98 der benachbarten Untereinheiten (A und D bzw. B und C) der Tryptase in der S3/S4-Region eingehen kann.

15

Daneben können die Kopfgruppen K1 und/oder K2 auch positiv geladene Gruppen umfassen, die elektrostatische Wechselwirkungen mit der Carboxylatgruppe von Glu217 der Tryptase in der S3/S4-Tasche eingehen kann. Eine weitere Verbesserung der Gesamtbindung kann durch Kopfgruppen K1 und/oder K2 erzielt werden, die mit dem elektronegativen Feld um S3/S4 und
20 S6 der Tryptaseeinheiten elektrostatische Wechselwirkungen eingehen können.

Die Erfindung umfaßt auch einen bifunktionellen Inhibitor wie oben beschrieben, bei dem die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen durch den Linker L in einem Abstand von 34 bis 56 Å gehalten werden, sodass sie Wechselwirkungen mit den Carboxylatgruppen von Asp189 der
25 Tryptaseuntereinheiten A und B oder A und C oder B und D oder C und D eingehen können.

Die Erfindung umfasst sowohl symmetrische als auch unsymmetrische bifunktionelle Inhibitoren. Wesentlich ist, dass die Kopfgruppen in einem Abstand vorliegen, der ihre Wechselwirkung mit der Substrat-Spezifitätstasche der einzelnen Tryptaseuntereinheiten ermöglicht.

30

Die erfindungsgemäßen Inhibitoren weisen bevorzugt einen K_i -Wert $< 100 \mu\text{mol}$, insbesondere $< 1 \mu\text{mol}$, besonders bevorzugt $< 100 \text{ nmol}$ und am meisten bevorzugt $< 10 \text{ nmol}$ auf.

Die Erfindung umfasst auch einen bifunktionellen Inhibitor wie oben beschrieben, der eine oder
35 zwei weitere funktionelle Gruppen Q umfasst, die derart angeordnet sind, dass sie mit weiteren Substrat-Spezifitätstaschen von weiteren Tryptase-Monomeren des Tryptase-Tetramers Wechselwirkungen eingehen können. Ein solcher multifunktionaler Inhibitor muss geometrisch derart ausgestaltet sein, dass er für die funktionellen Gruppen Q sowie für die Gesamtgröße des

Moleküls die in Figur 1 angegebenen geometrischen Rahmenbedingungen erfüllt.

Die Verbindungen der Formel I setzen sich aus einer Vielzahl divalenter Bausteine (M, A1, A2, A3, A4, A5, A6, B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11, B12, Z1 und Z2) zusammen. Ihre Synthese kann grundsätzlich ausgehend von jedem dieser Bausteine erfolgen. Bei weitgehend symmetrisch aufgebauten Verbindungen der Formel I ist der Aufbau beginnend vom Zentralbaustein M bevorzugt, während bei überwiegend unsymmetrischen Verbindungen der Formel I die Synthese ausgehend von einem der Endgruppen K1 oder K2 vorteilhaft sein kann.

10

Die Verknüpfung der Bausteine erfolgt dabei immer nach dem gleichen, dem Fachmann an sich bekannten Muster.

Der Fachmann ist bekannt, daß die Verbindungen der Formel I entweder Baustein für Baustein aufgebaut werden können, oder daß zunächst größere aus mehreren Einzelbausteinen bestehende Fragmente erstellt werden können, die anschließend zum Gesamtmolekül zusammengesetzt werden.

Aufgrund der Bedeutungen, die die einzelnen Bausteine der Verbindungen der Formel I annehmen können, treten in den Verbindungen der Formel I Amino- [-NH-], Ether [-O-], Thioether [-S-], Keto- [-C(O)-], Thioketo- [-C(S)-], Sulfonyl- [-S(O)₂-], Ester- [-O-C(O)-, -C(O)-O-], Amid- [-C(O)-NH-, -NH-C(O)-], Sulfonamid [-SO₂-NH-, -NH-SO₂-], Carbamat [-NH-C(O)-O-, -O-C(O)-NH-], Carbamid- (-NH-C(O)-NH-) oder Carbonatbrücken [-O-C(O)-O-] auf.

25

Die Art und Weise, wie solche Brücken hergestellt werden, sind dem Fachmann an sich bekannt, geeignete Methoden und Ausgangsverbindungen zu ihrer Herstellung werden beispielsweise in March, Advanced Organic Chemistry, Reactions, Mechanisms and Structure, Third Edition, 1985, John Wiley & Sons beschrieben.

30

Ether- und Thioetherbrücken können beispielsweise nach der Methode von Williamson hergestellt werden.

Keto- oder Thioketobrücken können beispielsweise als Bestandteil größerer Bausteine, wie z. B. dem 1,3-Dichloraceton eingeführt werden.

35

Sulfonylbrücken können beispielsweise durch Oxidation von Thioetherbrücken erhalten werden.

Für den Aufbau von Esterbrücken ist eine Vielzahl von Methoden bekannt. Beispielhaft genannt sei hier die Umsetzung von Säuren mit Alkoholen, vorzugsweise unter Verwendung von H_2SO_4 oder p-Toluolsulfonsäure als Katalysator; oder unter Zugabe eines wasserentziehenden Mittels, wie zum Beispiel Molekularsieb oder einem Carbodiimid. Desweiteren kann hier die Umsetzung von Säurechloriden mit Alkoholen genannt werden.

Auch für die Darstellung von Amidbrücken gibt es eine Vielzahl bekannter Methoden. Als Beispiel sei hier die Umsetzung von Säurechloriden mit primären oder sekundären Aminen genannt. Desweiteren sei auch auf all die Methoden verwiesen, die für die Peptidchemie entwickelt wurden. Entsprechend lassen sich aus Sulfonsäurechloriden und primären oder sekundären Aminen Sulfonamidbrücken aufbauen.

Carbamatbrücken können z. B. durch Reaktion von Chlorkohlensäureestern mit Aminen hergestellt werden. Die Chlorkohlensäureester ihrerseits können aus Alkoholen und Phosgen aufgebaut werden. Eine weitere Variante zum Aufbau von Carbamatbrücken stellt die Addition von Alkoholen an Isocyanate dar.

Ähnlich wie bei den Carbamatbrücken können ausgehend von Chlorkohlensäureestern durch Umsetzung mit Alkoholen (anstatt Aminen) Carbonatbrücken hergestellt werden.

Carbamidbrücken lassen sich z. B. durch die Reaktion von Isocyanaten mit Aminen herstellen.

Die N-Oxidation erfolgt auf eine dem Fachmann ebenfalls vertraute Weise, z.B. mit Hilfe von m-Chlorperoxibenzoesäure in Dichlormethan bei Raumtemperatur. Welche Reaktionsbedingungen für die Durchführung des Verfahrens im einzelnen erforderlich sind, ist dem Fachmann aufgrund seines Fachwissens geläufig.

Die Isolierung und Reinigung der erfindungsgemäßen Substanzen erfolgt in an sich bekannter Weise z.B. derart, daß man das Lösungsmittel im Vakuum abdestilliert und den erhaltenen Rückstand aus einem geeigneten Lösungsmittel umkristallisiert oder einer der üblichen Reinigungsmethoden, wie beispielsweise der Säulenchromatographie an geeignetem Trägermaterial, unterwirft.

Salze erhält man durch Auflösen der freien Verbindung in einem geeigneten Lösungsmittel, z.B. in einem chlorierten Kohlenwasserstoff, wie Methylenchlorid oder Chloroform, oder einem niedermolekularen aliphatischen Alkohol (Ethanol, Isopropanol), das die gewünschte

Säure bzw. Base enthält, oder dem die gewünschte Säure bzw. Base anschließend zugegeben wird. Die Salze werden durch Filtrieren, Umfällen, Ausfällen mit einem Nichtlösungsmittel für das Anlagerungssalz oder durch Verdampfen des Lösungsmittels gewonnen. Erhaltene Salze können durch Alkalisierung bzw. durch Ansäuern in die freien Verbindungen
5 umgewandelt werden, welche wiederum in Salze übergeführt werden können. Auf diese Weise lassen sich pharmakologisch nicht verträgliche Salze in pharmakologisch verträgliche Salze umwandeln.

Die Herstellung von Verbindungen der Formel I sei exemplarisch an Hand der nachfolgenden
10 Beispiele 4-14 und der Figuren 8-19 aufgezeigt. Weitere Verbindungen der Formel I können analog oder unter Anwendung der oben aufgeführten, dem Fachmann an sich bekannten Methoden hergestellt werden.

Die Erfindung betrifft weiterhin humane Tryptase in kristallisierter Form. Eine solche kristallisierte Tryptase war bisher im Stand der Technik nicht bekannt, ist aber hilfreich für die
15 Entwicklung von Tryptaseinhibitoren. Eine solche kristallisierte humane Tryptase ist insbesondere durch die tetragonale Raumgruppe $P4_1$ und die Zellachsen $a = b = 83 \text{ \AA} \pm 5 \text{ \AA}$ und $c = 127 \text{ \AA} \pm 5 \text{ \AA}$, bevorzugt $a = b = 83 \text{ \AA} \pm 2 \text{ \AA}$ und $c = 127 \text{ \AA} \pm 2 \text{ \AA}$ und besonders bevorzugt $a = b = 83 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$ und $c = 127 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$ charakterisiert. Die Kristalle enthalten ein Tryptasetetramer pro
20 asymmetrischer Einheit.

Die Erfindung betrifft weiterhin ein Verfahren zur Herstellung von humaner Tryptase in kristallisierter Form, welches dadurch gekennzeichnet ist, dass die Kristalle durch Dampfdiffusion oder Dialyse erhalten werden. Es ist auch möglich, ein anderes, dem Fachmann
25 bekanntes, übliches Kristallisationsverfahren einzusetzen. Zur Kristallisierung wird das Protein bevorzugt zunächst inhibiert, beispielsweise mit einem Überschuß von 4-Amidinophenylbrenztraubensäure (APPA). Nach Aufkonzentrierung, bevorzugt in der Größenordnung von 1 bis 10 mg/ml, insbesondere 3 bis 5 mg/ml, beispielsweise in einem 8 mM 2-(N-Morpholino)ethansulfonsäurepuffer, wird das Protein beispielsweise gegen 0,2M
30 3-(N-morpholino)propansulfonsäure in Ammoniumsulfat äquilibriert. Geeignete Kristalle werden durch Tropfen-Dampfdiffusion (vorzugsweise durch hanging oder sitting-drop vapour diffusion) erhalten. Tryptase-Kristalle können insbesondere durch Röntgenstrukturanalyse hinsichtlich ihrer Geometrie analysiert werden. Die dadurch erhaltenen Daten können unmittelbar zur Entwicklung von geeigneten Tryptase-Inhibitoren herangezogen werden. Deshalb umfasst die
35 Erfindung auch ein Verfahren zur Entwicklung und/oder Identifizierung von Tryptase-Inhibitoren, welches dadurch gekennzeichnet ist, dass man anhand der Kristallstrukturdaten von kristallisierter Tryptase die Struktur des Inhibitors festlegt. Dies bedeutet insbesondere, dass man anhand der Kristallstrukturdaten von kristallisierter Tryptase die Struktur möglicher Inhibitoren

modelliert. Auf diese Weise können insbesondere bi- oder multifunktionelle Inhibitoren entwickelt werden, die eine hohe Wirksamkeit und eine hohe Spezifität für Tryptase aufweisen. Es ist aber auch möglich, monofunktionelle Inhibitoren zu entwickeln. Mit dem erfindungsgemäßen Verfahren können Verbindungen entwickelt werden, die Tryptase hemmen, ohne auf aufwendige "trial and error" Versuche angewiesen zu sein.

Die Erfindung betrifft weiterhin eine pharmazeutische Zusammensetzung, umfassend einen wie oben beschriebenen Tryptaseinhibitor. Eine solche pharmazeutische Zusammensetzung kann gegebenenfalls übliche pharmazeutische Träger oder/und Hilfsstoffe umfassen. Aufgrund des Zusammenhangs von Tryptase und einer Vielzahl von allergischen und entzündlichen Erkrankungen, wie insbesondere Asthma, Psoriasis, Arthritis, Gingivitis, Peridontitis, Rhinitis, Konjunktivitis, Dermatitis, Anaphylaxis, rheumatische Arthritis, ARDS (adult respiratory distress syndrome), Entzündungen im Magen-Darm-Bereich (Morbus Crohn, Inflammatory Bowel Disease) und anderen finden die erfindungsgemäßen pharmazeutischen Zusammensetzungen breite Anwendung. Der Tryptaseinhibitor liegt dabei in einer therapeutisch wirksamen Menge vor. Die pharmazeutische Zusammensetzung kann in allen üblichen Anwendungsformen verwendet werden. Bevorzugt liegt sie in einer Applikationsform zur topischen Anwendung vor. Beispiele hierfür sind die Verwendung als Aerosol oder als Salbe. Es ist aber auch möglich, die erfindungsgemäßen pharmazeutischen Zusammensetzungen zur oralen oder subkutanen Verabreichung bereitzustellen. Geeignete Trägerstoffe hierfür sind dem Fachmann bekannt und umfassen beispielsweise übliche Tablettierhilfsstoffe bzw. physiologische Salzlösungen.

Die Dosierung der Wirkstoffe bei systemischer Therapie. (p. o. oder i. v) liegt zwischen 0,1 und 10 mg pro Kilogramm und Tag.

Aufgrund der hohen Spezifität, die mit den erfindungsgemäßen bifunktionellen Inhibitoren erzielbar ist, eignen sie sich auch zur Diagnose von mit Tryptase in Zusammenhang stehenden Erkrankungen. Ein weiterer Gegenstand der Erfindung ist deshalb die Verwendung eines erfindungsgemäßen Tryptaseinhibitors zur Diagnose, insbesondere von allergischen und entzündlichen Erkrankungen. Daneben ist es auch möglich, mit den erfindungsgemäßen Tryptaseinhibitoren den Wirkungsmechanismus von Tryptase im einzelnen zu untersuchen und aufzuklären.

Die Erfindung wird durch die beigefügten Figuren und die nachfolgenden Beispiele weiter erläutert.

Figur 1 zeigt eine schematische Darstellung der tetrameren Struktur von Tryptase in Form eines Schnitts (11).

Die Tryptase (11) besitzt eine rahmenförmige Gestalt, in der vier strukturell identische Untereinheiten (Monomere) A (7), B (9), C (10) und D (8) die Ecken besetzen und gemeinsam einen zentralen Hohlraum (12) umschließen. Die Untereinheiten bilden in ihren aktiven Zentren

5 Spezifitätstaschen (6) aus. Bestandteil der Spezifitätstaschen (6) sind Asp189 Reste (5) der jeweiligen Untereinheiten. Die Abstände [(13)-(18)] zwischen den Carboxylgruppen der Asp189 Reste (5) in den jeweiligen Untereinheiten betragen

	zwischen A (7) und B (9)	$45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$	(13),
10	zwischen A (7) und C (10)	$45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$	(14),
	zwischen A (7) und D (8)	$33 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$	(15),
	zwischen B (9) und C (10)	$33 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$	(16),
	zwischen B (9) und D (8)	$45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$	(17) und
	zwischen C (10) und D (8)	$45 \text{ \AA} \pm 1 \text{ \AA}$	(18).

15

Schematisch dargestellt ist auch ein Tryptase-Inhibitor 1 dessen Kopfgruppen K1 (2) und K2 (3) mit den Carboxylgruppen der Asp189 Reste (5) in den Spezifitätstaschen (6) der Untereinheiten A (7) und D (8) der Tryptase (11) wechselwirken. Der Linker L (4) liegt in dem von den vier Untereinheiten umschlossenen Hohlraum (12).

20

Figur 2a zeigt eine Frontansicht einer Oberflächendarstellung eines festen Tryptasetetramers.

Die vier Untereinheiten (als A bis D bezeichnet) stehen durch drei zweifache Symmetrieachsen miteinander in Beziehung: zwei senkrecht zueinander entlang den Grenzflächen A-B/C-D und

25 A-D/B-C, die in der Papierebene liegen, die dritte senkrecht zu den anderen zweien, durch die Mitte des Tetramers. Die zentrale, langgestreckte Pore von Tryptase ist deutlich sichtbar. Kleine Vorsprünge von jeder der Untereinheiten verdecken teilweise den Eingang zu dieser Pore. Das elektrostatische Potential der Oberfläche ist durch + (positiv geladene Bereiche) und - (negativ geladene Bereiche) dargestellt (in der beigefügten farbigen Abbildung stellt dar: blau positiv

30 geladene Bereiche und rot negativ geladene Bereiche dar). Der an den aktiven Stellen jeder Untereinheit gelegene Inhibitor 4-Amidinophenylbrenztraubensäure (APPA) ist mit I bezeichnet (in Farbe: gelb-grün).

Figur 2b zeigt die Seitenansicht der Einheiten D und C. Ein schräger, langgestreckter Fleck mit

35 positivem Potential (+ bzw. blau) bildet eine mögliche, 108 Å lange Heparin-Bindestelle, die den Kontaktbereich zwischen den beiden Untereinheiten überspannt. Die Länge dieses Flecks ist mit der bekannten Stabilisierungsaktivität von 5,5 kDa (18-mer) und längeren Heparinketten kompatibel. (Alter et al., Biochem. J. 248 (1987), 821-827). (Die Figur wurde mit GRASP

erzeugt (Nichols et al., Biophys. J. 64 (1993) A166)).

Figur 3 zeigt eine Stereo-Banddarstellung eines Trypsasemonomers (A in Standardorientierung) mit Sekundärstrukturelementen und dem APPA-Molekül. Die Reste der aktiven Stelle sind hervorgehoben sowie die einzigartigen Oberflächenschleifen von Trypsase, nämlich (gegen den Uhrzeigersinn aufgelistet) die 37er-Schleife, die 60er-Schleife, die 97er-Schleife, 173er-Schleife, die 147er-Schleife und die 70 bis 80er-Schleife (die Figur wurde mit SETOR hergestellt (S.V. Evans, J. Mol. Graphics 11 (1990), 134-138)).

Figur 4 stellt einen Aminosäuresequenz-Vergleich auf Grundlage der Struktur von humaner Mastzelltrypsase II/β, Rindertrypsin und Rinderchymotrypsinogen A dar. Sequenzidentität und Homologie sind in gelb bzw. grün dargestellt. Eine Nummerierung auf Grundlage der Trypsase ist oberhalb der Sequenzen und eine Nummerierung auf Grundlage von Chymotrypsinogen (wie sie hierin oben verwendet wurde) ist unterhalb der Sequenzen angegeben. Die katalytischen Reste sind durch offene Dreiecke markiert und die Disulfidbrücken bildenden Cysteine durch ausgefüllte Dreiecke. Sekundäre Strukturelemente der Trypsase sind schematisch dargestellt (α1-α2 stellt α-Helizes dar, β1 bis β12 β-Stränge). (Die Figur wurde mit ALSCRIPT hergestellt (G. J. Barton, Protein Eng. 6 (1993), 37-40)).

Figur 5 stellt die Kontaktbereiche zwischen den Monomeren A und B (5a) bzw. A und C (5b) dar.

Figur 6 zeigt die finale 3 Å Elektronendichte um die Spezifitätstasche des APPA-Trypsase-Komplexes dar.

25

Figur 7 stellt die experimentelle Struktur des Trypsase-Tetramers mit einem am Monomer angedockten LDTI-Molekül dar.

Figuren 8, 9, 10, 11, 12, 13, 14, 15, 16, 17, 18 und 19 zeigen Formelschemata für die Herstellung von erfindungsgemäßen bifunktionellen Inhibitoren.

30

Figur 20 zeigt die aus der Röntgenstrukturanalyse gewonnenen räumlichen Koordinaten der Atome der humanen β-Trypsase (EC 3.4.21.59) im Brookhaven PDB-Format.

Beispiele

Beispiel 1: Proteinreinigung und Kristallisation

5

Tryptase wurde von humanem Lungengewebe bis zur offensichtlichen Homogenität unter Verwendung von bekannten Verfahren aufgereinigt (Schwartz et al., J. Biol. Chem. 256 (1981), 11939-11943; Smith et al., J. Biol. Chem. 259 (1984), 11046 bis 11051; Harvima et al., Biochim. Biophys. Acta 957 (1988), 71-80). Das Protein wurde mit einem Überschuss von 4-Amidinophenylbrenztraubensäure (APPA) inhibiert, auf 4 mg/ml in 8 mM 2-(N-Morpholino)ethansulfonsäurepuffer, pH 6,1, 1,7M Natriumchlorid konzentriert und bei 4°C gegen 0,2M 3-(N-Morpholino)propansulfonsäurepuffer, pH 5,0 und 3M Ammoniumsulfat äquilibriert. Zur Diffraktionsanalyse geeignete Kristalle wurden durch Dampfdiffusion eines sitzenden Tropfens erhalten. Die Kristalle zeigen die tetragonale Raumgruppe $P4_1$, haben Zellachsen $a = b = 83 \text{ \AA}$, $c = 173 \text{ \AA}$, insbesondere $a = b = 82,93 \text{ \AA}$, $c = 172,86 \text{ \AA}$ und enthalten ein Tetramer pro asymmetrischer Einheit.

Beispiel 2: Kristallographische Verfahren und Daten

Daten mit einer Auflösung von $2,7 \text{ \AA}$ wurden auf einem 300 mm MAR Research image plate detector unter Verwendung von monochromatischer $\text{CuK}\alpha$ -Strahlung von einem rotierenden Anodenröntgenstrahlgenerator (Rigaku) gesammelt. Die Datenintegration und Reduktion der Intensitäten wurde mit DENZO/SCALEPACK durchgeführt (Otwinowski et al., "DENZO: a film processing for macromolecular crystallography, Yale University, New Haven (1993) und die Umwandlung auf Strukturfaktoramplituden mit TRUNCATE (French et al, Acta Cryst. 21 (1978), 517-525). Die Struktur wurde durch molekulare Ersetzungsverfahren (molecular replacement methods) unter Verwendung von AMoRe gelöst (Navaza, Acta Cryst. A50 (1994), 157-163), unter Verwendung eines reduzierten Modells von Schweinepankreaselastase als Suchmodell. Der Modellbau wurde auf einer SGI-Graphic Workstation unter Verwendung von TurboFRODO durchgeführt (Roussel et al., TurboFRODO in Silicon Graphics geometry, Silicon Graphics, Mountain View, CA (1989).) Die kristallographische Verfeinerung und Berechnungen der Elektronendichte wurden mit X-PLOR und CCP4 durchgeführt (A.T. Brünger, XPLOR Manual, Version 3.1, Yale University, New Haven, CT (1992); Collaborative Computational Project No. 4 (1994), Acta Cryst. D50, 760-763. Das endgültige Modell hatte einen R-Faktor von 19,6 % ($R_{\text{free}} = 28,6 \%$) mit einer r.m.s. Abweichung von den Zielwerten von $0,007 \text{ \AA}$ und $1,741^\circ$ für Bindungslängen bzw. Winkel.

Beispiel 3: Aminosäuresequenz

Die Aminosäuresequenz von humaner β -Tryptase (d.h. Tryptase II; EC 3.4.21.59), wie sie in den EMBL/PIR-Datensätzen (Eintragungen M37488/B35863 bzw. M33492/P20231) vorliegt, wurde verwendet. Diese Sequenz wurde durch Spaltung des Kristallisationsmaterials mit Trypsin und massenspektrometrischer Analyse der resultierenden Fragmente bestätigt. Die Aminosäurenummerierung folgt der des Chymotrypsinogens (vgl. Figur 4).

Herstellung bifunktionaler Tryptase-Inhibitoren (Beispiel 4 - 14)

10

Beispiel 4:

ENDPRODUKT:

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid] (1) (vgl. Fig. 8)

15

Zu einer Lösung von 600 mg (780 μ mol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-butyloxycarbonyl-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid] in 7 ml Dioxan tropft man 1,3 ml einer 4,8 N Lösung von HCl in Dioxan (6,2 mmol). Die dicke Suspension wird mit 10 ml Methanol versetzt und 2,5 Std. gerührt. Man engt ein, nimmt in 25 ml Wasser auf und stellt die Lösung auf pH = 11 (NaOH). Man extrahiert mit 3 x 20 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über $MgSO_4$ und engt ein. Das Produkt wird in 2 ml Dioxan gelöst, mit 0,5 ml einer 4,8 N Lösung von HCl in Dioxan (2,4 mmol) versetzt und die Suspension mit 15 ml Diethylether verdünnt. Die Titelverbindung wird als Hydrochlorid vom Schmp. > 260 °C isoliert.

25 AUSGANGSVERBINDUNGEN:

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-tert-butyloxycarbonyl-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid] (2)

Zu einer Suspension von 500 mg (1,21 mmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-piperazid-trihydrochlorid in 15 ml DMF gibt man nacheinander 1,36 ml (9,7 mmol) Triethylamin, 610 mg (2,42 mmol) 3-tert-Butyloxycarbonylaminomethyl-benzoesäure, 330 mg (2,42 mmol) 1-Hydroxybenzotriazol und 460 mg (2,42 mmol) N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethyl-carbodiimid-hydrochlorid (EDC x HCl). Nach 75 min wird das Reaktionsgemisch weitgehend eingeeengt, mit 20 ml Wasser versetzt und auf pH = 11 gestellt (NaOH). Man extrahiert mit 3 x 20 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über $MgSO_4$, engt ein und chromatographiert das Rohprodukt über Kieselgel (Ethylacetat/Methanol = 10:1). Das Eluat wird eingeeengt und in Diethylether ausgerührt. Man erhält 700 mg (75 %) der Titelverbindung vom Schmp. 195 °C (Aufschäumen bei 110 °C).

35

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-piperazid (3)

Zu einer Suspension von 2,05 g (4,07 mmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-4-tert-butyloxy-carbonyl-piperazid in 20 ml Dioxan werden 6,8 ml einer 4,8 N Lösung von HCl in Dioxan (16,2 mmol) zugetropft. Man verdünnt die Suspension mit 10 ml Methanol und rührt bei Raumtemperatur über Nacht. Das Lösungsmittel wird weitgehend eingeeengt, die Suspension mit Diethylether ausgerührt und unter Schutzgasatmosphäre filtriert. Man erhält 1,7 g (100 %) des Trihydrochlorids der Titelverbindung. Schmp. > 260 °C.

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-4-tert-butyloxycarbonyl-piperazid (4)

1,0 g (5,0 mmol) 2,6-Pyridindicarbonyldichlorid in 10 ml Dioxan werden zu einer Lösung von 1,88 g (10,1 mmol) Piperazin-N-carbonsäure-tert-butylester in 0,82 ml (10,1 mmol) Pyridin, 3,5 ml (25,2 mmol) Triethylamin und 10 ml Dioxan getropft. Man rührt bei Raumtemperatur über Nacht, filtriert vom Niederschlag ab und engt die Mutterlauge zur Trockne ein. Der Rückstand wird mit 3 x 30 ml Dichlormethan aus 30 ml Wasser extrahiert. Die über MgSO₄ getrocknete organische Phase wird eingeeengt und aus Diethylether kristallisiert. Man erhält 2,16 g (90 %) der Titelverbindung vom Schmp. 183-186 °C.

Beispiel 5:**ENDPRODUKTE****Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(trans-4-aminomethylcyclohexanoyl)-1-piperazid] (5)**
(vgl. Fig. 9)

Zu einer Lösung von 500 mg (640 µmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(trans-4-tert-butyloxy-carbonylaminomethylcyclohexylcarbonyl)-1-piperazid] in 10 ml Dioxan tropft man 1,06 ml einer 4,6 N Lösung von HCl in Dioxan (5,1 mmol). Die dicke Suspension wird mit 20 ml Methanol versetzt und 4 Std. bei 40 °C gerührt. Man engt ein, koevaporiert mit 2 x 20 ml Toluol und kristallisiert den Rückstand aus Diethylether. Die Titelverbindung wird als Dihydrochlorid vom Schmp. 170 °C (Aufschäumen) isoliert.

2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-[4-(3-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid] (7) (vgl. Fig. 10)

Zu einer Lösung von 350 mg (0,4 mmol) 2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-

[4-(3-tert-butyloxycarbonyl-aminomethyl-benzoyl)-1-piperazid] in 5 ml Dioxan und 5 ml Methanol gibt man 522 µl einer 4,6 N Lösung von HCl in Dioxan (2,4 mmol). Nach Rühren über Nacht bei Raumtemperatur werden nochmals 200 µl (0,9 mmol) HCl in Dioxan zugegeben und das Reaktionsgemisch 5 Std. auf 40 °C erhitzt. Man engt ein, verrührt den Rückstand mit 5 ml Dioxan und 2 ml Diethylether und isoliert die Titelverbindung als Dihydrochlorid vom Schmp. 250 °C (Sintern bei 223 °C).

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

10 Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(trans-4-tert-butyloxycarbonyl-aminomethylcyclohexyl-carbonyl)-1-piperazid] (6)

Zu einer Suspension von 500 mg (1,21 mmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-piperazid-trihydrochlorid in 15 ml DMF gibt man nacheinander 1,36 ml (9,7 mmol) Triethylamin, 620 mg (2,42 mmol) trans-4-tert-Butyloxycarbonyl-aminomethylcyclohexancarbonsäure, 330 mg (2,42 mmol) 1-Hydroxybenzotriazol und 460 mg (2,42 mmol) N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethyl-carbodiimid-hydrochlorid (EDC x HCl). Nach 45 min wird das Reaktionsgemisch weitgehend eingengt, mit 20 ml Wasser versetzt und auf pH = 12 gestellt (NaOH). Man extrahiert mit 3 x 20 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über MgSO₄, engt ein und chromatographiert das Rohprodukt über Kieselgel (Ethylacetat/Methanol/Ammoniak = 10:1:0,5). Das Eluat wird eingengt und in Diisopropylether ausgerührt. Man erhält 620 mg (65 %) der Titelverbindung vom Schmp. 200-202 °C.

25 2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-[4-(3-tert-butyloxycarbonyl-aminomethylbenzoyl)-1-piperazid] (8)

Zu einer Suspension von 220 mg (0,53 mmol) 2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-piperazid in 10 ml DMF gibt man nacheinander 500 µl (4,2 mmol) Triethylamin, 280 mg (1,1 mmol) 3-tert-Butyloxycarbonylaminomethyl-benzoesäure, 280 mg (1,1 mmol) 1-Hydroxybenzotriazol und 280 mg (2,1 mmol) N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethyl-carbodiimid-hydrochlorid (EDC x HCl). Nach 4 Std. wird das Reaktionsgemisch weitgehend eingengt, mit 30 ml Wasser versetzt und auf pH = 12 gestellt (NaOH). Man extrahiert mit insgesamt 70 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über MgSO₄, engt ein und chromatographiert das Rohprodukt über Kieselgel (Ethylacetat/Methanol = 10:1). Das Eluat wird eingengt und der Rückstand in Diisopropylether ausgerührt. Man erhält 446 mg (96 %) der Titelverbindung vom Schmp. 113 °C.

2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-piperazid (9)

- 5 Zu einer Suspension von 5,87 g (9,6 mmol) 2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-4-tert-butyloxycarbonyl-piperazid in 20 ml Dioxan und 10 ml Methanol werden 12,6 ml einer 4,6 N Lösung von HCl in Dioxan (57,6 mmol) zugetropft. Man rührt 5 Std. bei Raumtemperatur. Das Lösungsmittel wird eingeeengt und der Rückstand mit 30 ml Diethylether und 70 ml Methanol ausgerührt. Man erhält 4,35 g (94 %) des Dihydrochlorids der Titelverbindung vom Schmp. > 250 °C.

10 **2,6-Dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarbonsäure-bis-4-tert-butyloxycarbonyl-piperazid (10)**

- 15 13,0 g (mmol) Dikalium-2,6-dimethyl-4-phenyl-pyridin-3,5-dicarboxylat werden in 80 ml Phosphoroxychlorid unter Stickstoffatmosphäre 5 Std. bei 100 °C gekocht. Das Phosphoroxychlorid wird im Vakuum abdestilliert und der Rückstand mit 3 x 50 ml Toluol koevaporiert. Zu einer Lösung von 12,8 g (66 mmol) Piperazin-N-Carbonsäure-tert-butylester, 5,3 ml (66 mmol) Pyridin und 46 ml (450 mmol) Triethylamin in 100 ml Dioxan tropft man unter Temperaturkontrolle (< 30 °C) eine Suspension des rohen Säurechlorids in 200 ml Dioxan. Nach einer Stunde werden die anorganischen Salze abfiltriert und das Filtrat eingeeengt. Der Rückstand wird mit 3 x 20 70 ml Ethylacetat aus 100 ml Wasser extrahiert. Die über MgSO₄ getrockneten vereinigten organischen Phasen werden eingeeengt und über Kieselgel chromatographiert (Ethylacetat/Methanol = 10:1). Man erhält 7,13 g (35 %) der Titelverbindung als gelbliches Öl.

Beispiel 6:

25

ENDPRODUKT:

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-aminomethyl-benzoylamino)-1-piperidid] (11)

(vgl. Fig. 11)

- 30 Zu einer Lösung von 220 mg (275 µmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-tert-butyloxycarbonyl-aminomethyl-benzoylamino)-1-piperidid] in 5 ml Dioxan tropft man 275 µl einer 4 N Lösung von HCl in Dioxan (1,1 mmol). Die dicke Suspension wird mit 3 ml Methanol versetzt und 12 Std. gerührt. Man engt ein, koevaporiert mit 2 x 20 ml Toluol und kristallisiert. Man erhält 130 mg der Titelverbindung vom Schmp. 230° C (Aufschäumen).

35

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(3-tert-butyloxycarbonyl-aminomethyl-benzoyl-amino)-1-piperidid] (12)

- 5 Zu einer Suspension von 250 mg (0,62 mmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-(4-amino-1-piperidid) Dihydrochlorid in 2,5 ml DMF und 2,5 ml Dioxan gibt man nacheinander 342 mg (1,36 mmol) 3-tert-Butyloxycarbonylaminomethyl-benzoesäure, 240 µl (1,36 mmol) Hünig Base, 30 mg Diaminopyridin und 260 mg (1,36 mmol) N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethyl-carbodiimid-hydrochlorid (EDC x HCl). Nach 12 Std. Rühren bei Raumtemp. wird das
- 10 Reaktionsgemisch eingeeengt, mit 10 ml Wasser versetzt und auf pH = 3 gestellt (0,1 N HCl). Man extrahiert mit 3 x 20 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über MgSO₄, engt ein und chromatographiert das Rohprodukt über Kieselgel (Dichlormethan/Methanol = 19:1). Das produktthaltige Eluat wird eingeeengt und in Diethyl-ether ausgerührt. Man erhält 280 mg (57%) der Titelverbindung vom Schmp. 140°C (Auf-
- 15 schäumen, Sintern ab 120°C).

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-(4-amino-1-piperidid) (13)

- Zu einer Lösung von 2,0 g (3,76 mmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-4-tert-butyloxycarbonylamino-1-piperidid in 10 ml Diethylether, 30 ml Methanol und 20 ml Dichlormethan tropft
- 20 man 12 ml einer 6 N Lösung von HCl in Diethylether (72 mmol) und erhitzt das Reaktionsgemisch 2 Std. auf 40° C. Das Lösungsmittel wird eingeeengt, der Rückstand mit Diethylether ausgerührt und unter Schutzgasatmosphäre abfiltriert. Man erhält 1,52 g (100%) des Dihydrochlorids der Titelverbindung. Schmp. 130°C.

25

Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-4-tert-butyloxycarbonylamino-1-piperidid (14)

- 850 mg (4,05 mmol) 2,6-Pyridindicarbonyldichlorid in 10 ml Dioxan werden zu einer Suspension von 1,67 g (8,08 mmol) Piperidin-N-carbonsäure-tert-butylester in 0,65 ml (8,08 mmol)
- 30 Pyridin, 2,8 ml (20 mmol) Triethylamin und 10 ml Dioxan getropft. Man rührt bei Raumtemp. über Nacht und engt ein. Der Rückstand wird mit 30 ml Wasser versetzt und mit NaOH basisch gestellt (pH = 11). Man extrahiert mit 3 x 30 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über MgSO₄, engt ein und kristallisiert aus Diethylether. Man erhält 2,12 g (99%) der Titelverbindung vom Schmp. 90°C.

35

Beispiel 7:**ENDPRODUKT:****Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(4-aminomethyl-cyclohexylcarbonylamino)-1-piperidid]**

5 **(15)** (vgl. Figur 12)

Zu einer Suspension von 160 mg (197 µmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(4-tert-butyl-oxycarbonyl-aminomethyl-cyclohexylcarbonyl-amino)-1-piperidid] in 10 ml Dioxan und 2 ml Methanol tropft man 500 µl einer 4 N Lösung von HCl in Dioxan (2,0 mmol) und rührt 12 Std. bei Raumtemp. Man engt ein, koevaporiert zweimal mit 50 ml Diethylether und rührt das Rohprodukt in Diethylether aus. Man erhält 100 mg der Titelverbindung vom Schmp. >250°C.

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

15 **Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-[4-(4-tert-butyloxycarbonyl-aminomethyl-cyclohexyl-carbonyl-amino)-1-piperidid] (16)**

Zu einer Suspension von 250 mg (0,62 mmol) Pyridin-2,6-dicarbonsäure-bis-(4-amino-1-piperidid) Dihydrochlorid in 2,5 ml DMF und 2,5 ml Dioxan gibt man nacheinander 350 mg (1,36 mmol) trans-3-tert-Butyloxycarbonylaminomethyl-cyclohexylcarbonsäure, 240 µl (1,36 mmol) Hünig Base, 30 mg Diaminopyridin und 260 mg (1,36 mmol) N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethyl-carbodiimid-hydrochlorid (EDC x HCl). Nach 12 Std. Rühren bei Raumtemp. wird das Reaktionsgemisch eingeeengt, mit 10 ml Wasser versetzt und auf pH = 3 gestellt (0,1 N HCl). Man extrahiert mit 3 x 20 ml Dichlormethan, trocknet die vereinigten organischen Phasen über MgSO₄, engt ein und chromatographiert das Rohprodukt über Kieselgel (Dichlormethan/Methanol = 19:1). Das produktthaltige Eluat wird eingeeengt und in Diethylether ausgerührt. Man erhält 230 mg (46%) der Titelverbindung vom Schmp. > 250°C.

Beispiel 8:

30 **ENDPRODUKT:**

Bis{4-[4-(4-aminomethyl)cyclohexanoyl]piperazin-1-yl}carbonyl}4,4'-diamino-diphenyl-ether Dihydrochlorid (17) (vgl. Fig. 13)

35 Bis{4-[4-(4-tert-butoxycarbonyl-aminomethyl)cyclohexanoyl-piperazin-1-yl]carbonyl}4,4'-diamino-diphenylether (0,18 g; 0,2 mmol) wird in 4,8 M HCl in Dioxan (5 ml) suspendiert. Die Suspension wird 24 Stunden bei 40 – 45°C gerührt. Nach Zugabe von Diethylether (25 ml) wird im Eisbad gekühlt. Das ausgefallene Produkt wird abgenutscht, mehrmals mit Diethylether gewaschen und im Vakuum getrocknet. Ausbeute: 0,12 g, weisser amorpher Feststoff.

MS (ESI): 703,4 (100) MH⁺

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

Bis[4-[4-(4-tert-butoxycarbonyl-aminomethyl)cyclohexanoyl-piperazin-1-yl]carbonyl]-

5 4,4'-diamino-diphenylether (18)

4,4'-Bis(1-piperazinylcarbonyl)diphenylether-dihydrochlorid (0,25 g; 0,5 mmol), Boc-trans-
examsäure (0,28 g; 1,1 mmol), N-Ethyl-diisopropylamin (0,2 ml; 1,1 mmol) und 4-Dimethyl-
aminopyridin (5 mg) werden in Dimethylformamid (2,5 ml) und Dichlormethan (2,5 ml) 15
10 Minuten bei Raumtemperatur gerührt. Nach Zugabe von N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-
ethylcarbodiimid-hydrochlorid (0,21 g; 1,1 mmol) wird das Reaktionsgemisch 24 Stunden bei
40°C gerührt. Das Lösungsmittel wird im Vakuum vollständig abgezogen. Der Rückstand
wird an Kieselgel chromatographiert (Dichlormethan : Methanol – 9 : 1). Die Produktfraktion
wird gesammelt und das Lösungsmittel vollständig im Vakuum abgezogen. Ausbeute: 0,18 g,
15 weisser amorpher Feststoff.

MS (ESI): 903,1 (100) MH⁺

4,4'-Bis(1-piperazinylcarbonyl)diphenylether Dihydrochlorid (19)

20 4,4'-Bis[4-(tert-butoxycarbonyl)-1-piperazinylcarbonyl]diphenylether (6,4 g; 10,2 mmol)
wird in 4,8 M HCl in Dioxan (50 ml) suspendiert. Die Suspension wird 22 Stunden bei
40-45°C gerührt. Nach Zugabe von Diethylether (100 ml) wird im Eisbad gekühlt. Das
ausgefallene Produkt wird abgenutscht, mehrmals mit Diethylether gewaschen und im
Vakuum getrocknet. Ausbeute: 4,65 g, weisser amorpher Feststoff.

25 MS(APCI): 425,0 (100) MH⁺

4,4'-Bis[4-(tert-butoxycarbonyl)-1-piperazinylcarbonyl]diphenylether (20)

Zur gerührten Lösung von 1-tert.-Butoxycarbonylpiperazin (4,10 g; 22 mmol) in Dichlormethan
30 (50 ml) wird bei Raumtemperatur eine Lösung von Oxy-bis-(4-phenyl-isocyanat) (2,52 g,
10 mmol) in Dichlormethan (25 ml) zugetropft. Nach beendeter Zugabe wird weitere drei
Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Das ausgefallene Produkt wird abgenutscht, mehrmals
mit Hexan gewaschen und in Vakuum getrocknet. Ausbeute: 6,20 g weisser amorpher
Feststoff.

35 MS(EI): 625,5 (12) MH⁺; 271,2 (26); 118,2 (42); 187,1 (100)

Beispiel 9:

ENDPRODUKT:

Bis{4-[4-(3-aminomethyl)benzoyl-piperazin-1-yl]carbonyl}4,4'-diamino-diphenylether5 **Dihydrochlorid (21)** (vgl. Fig. 14)

Bis{4-[4-(3-tert-butoxycarbonyl-aminomethyl)benzoyl-piperazin-1-yl]carbonyl}4,4'-diamino-diphenylether (0,31 g; 0,35 mmol) wird in 4,8 M HCl in Dioxan (5 ml) 24 Stunden bei 40 - 45°C gerührt. Nach Zugabe von Diethylether (25 ml) wird im Eisbad gekühlt. Das
10 ausgefallene Produkt wird abgenutscht, mehrmals mit Diethylether gewaschen und im Vakuum getrocknet. Ausbeute: 0,19 g, weisser amorpher Feststoff.

MS (ESI): 691.2 (100) MH⁺

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

15 **Bis{4-[4-(3-tert-butoxycarbonyl-aminomethyl)benzoyl-piperazin-1-yl]carbonyl}4,4'-diamino-diphenylether (22)**

4,4'-Bis(1-piperazinylcarbonyl)diphenylether Dihydrochlorid (0,25 g; 0,5 mmol), 3-(tert.-butoxycarbonylaminomethyl)benzoesäure (0,28 g; 1,1 mmol), N-Ethyl-diisopropylamin (0,2 ml; 1,1 mmol) und 4-Dimethylaminopyridin (30 mg) werden in Dimethylformamid (2,5 ml) und
20 Dioxan (2,5 ml) 15 Minuten bei Raumtemperatur gerührt. Nach Zugabe von N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethylcarbodiimid-hydrochlorid (0,21 g; 1,1 mmol) wird das Reaktionsgemisch 24 Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Das Lösungsmittel wird im Vakuum vollständig abgezogen. Der Rückstand wird an Kieselgel chromatographiert (Dichlormethan :
25 Methanol – 9 : 1). Die Produktfraktion wird gesammelt und das Lösungsmittel vollständig im Vakuum abgezogen. Ausbeute: 0,32 g, viskoses Öl.

MS (ESI): 890.8, M⁺; 791.2, MH-Boc⁺**Beispiel 10:**

30

ENDPRODUKT:

Di{4-[4-(4-aminomethyl)cyclohexanoylamino]piperidin-1-yl-carbamoyl}cyclohexylmethan Dihydrochlorid (23) (vgl. Fig. 15)

Di{4-[4-(4-tert.-butoxycarbonyl-aminomethyl)cyclohexanoylamino]piperidin-1-yl-carbamoyl}-cyclohexylmethan (0,65 g; 0,7 mmol) wird in 4,8 M HCl in Dioxan (7 ml) 24 Stunden bei 40 – 45°C gerührt. Nach Zugabe von Diethylether (50 ml) wird im Eisbad gekühlt. Das ausgefallene

ne Produkt wird abgenutscht, mehrmals mit Diethylether gewaschen und im Vakuum getrocknet. Ausbeute: 0,26 g, weisser amorpher Feststoff.

MS (ESI): 741,5 (100) MH⁺

5 AUSGANGSVERBINDUNGEN:

Di[4-[4-(4-tert.-butoxycarbonyl-aminomethyl)cyclohexanoylamino]piperidin-1-yl-carbamoyl]cyclohexylmethan (24)

- 10 Di[4-(4-Amino-piperidin-1-yl-carbamoyl)]cyclohexyl-methan Dihydrochlorid (0,54 g; 1,0 mmol), Boc-tranexamsäure (0,57 g; 2,2 mmol), N-Ethyldiisopropylamin (0,38 ml; 2,2 mmol) und 4-Dimethylaminopyridin (30 mg) werden in Dimethylformamid (5 ml) und Dioxan (5 ml) 15 Minuten bei Raumtemperatur gerührt. Nach Zugabe von N-(3-Dimethylaminopropyl)-N'-ethylcarbodiimid-hydrochlorid (0,43 g; 2,2 mmol) wird das Reaktionsgemisch 48 Stunden bei 40°C gerührt. Das Lösungsmittel wird im Vakuum vollständig abgezogen. Der Rückstand wird an Kieselgel chromatographiert (Dichlormethan : Methanol; 9 : 1). Die Produktfraktion wird gesammelt und das Lösungsmittel vollständig im Vakuum abgezogen. Ausbeute: 0,65 g, viskoses Öl, das ohne Charakterisierung weiter umgesetzt wurde.

20 **Di[4-(4-Amino-piperidin-1-yl-carbamoyl)]cyclohexyl-methan Dihydrochlorid (25)**

- 25 Di[4-[4-(tert.-Butoxycarbamoyl)piperidin-1-yl-carbamoyl]]cyclohexyl-methan (4,90 g; 7,0 mmol) wird in 4,8 M HCl in Dioxan (50 ml) suspendiert. Die Suspension wird 48 Stunden bei 40 – 45°C gerührt. Nach Zugabe von Diethylether (100 ml) wird im Eisbad gekühlt. Das ausgefallene Produkt wird abgenutscht, mehrmals mit Diethylether gewaschen und im Vakuum getrocknet. Ausbeute: 4,10 g, weisser amorpher Feststoff.
MS(EI): 463,4 (100) MH⁺

Di[4-[4-(tert.-Butoxycarbamoyl)piperidin-1-yl-carbamoyl]]cyclohexyl-methan (26)

- 30 Zur gerührten Lösung von 4-tert.-Butoxycarbamoyl-piperidin (3,20 g; 16,0 mmol) in Dichlormethan (30 ml) wird bei Raumtemperatur eine Lösung von Dicyclohexylmethan-4,4'-diisocyanat (1,90 g; 7,3 mmol) in Dichlormethan (10 ml) zugetropft. Nach beendeter Zugabe wird weitere drei Stunden bei Raumtemperatur gerührt. Das ausgefallene Produkt wird abgenutscht, mehrmals mit Hexan gewaschen und in Vakuum getrocknet. Ausbeute: 4,10 g weisser amorpher Feststoff.
MS(ESI): 685,3 (57) MNa⁺; 663,2 (100) MH⁺

Beispiel 11:**ENDPRODUKT:****2,2-Bis{4-[4-(4-aminophenyl)-1-piperazinylcarbonyl-methoxy]phenyl}propan Dihydro-**5 **chlorid (27)** (vgl. Fig. 16)

0,65 g 2,2-Bis{4-[4-(4-nitrophenyl)-1-piperazinylcarbonyl-methoxy]phenyl}propan werden in 60 ml Eisessig gelöst und 0,2 g Palladiumkohle (10 %) zugegeben. Das Gemisch wird in einer Umlaufapparatur hydriert bis kein Ausgangsprodukt mehr nachweisbar ist (DC). Es wird vom
10 Katalysator über Celite abgesaugt und das Filtrat am Rotationsverdampfer im Vakuum bis zur Trocknung eingedampft. Der Rückstand wird im Dichlormethan gelöst, die Lösung mit NaHCO₃-Lösung gewaschen, über Na₂SO₄ getrocknet, filtriert und wieder eingeeengt. Der Rückstand wird
15 über eine Kieselgelsäule mit einem Gemisch aus Ethylacetat/Methanol/NH₄OH (25 %) im Verhältnis von 90:8:2 als Laufmittel chromatographiert. Die chromatographisch reinen
Fraktionen werden vereint, eingeeengt und der Rückstand in Dichlormethan gelöst. Nach Zugabe von ätherischer Salzsäure wird eingeeengt, noch zweimal mit Dichlormethan nachdestilliert und dann der Rückstand mit Ethylacetat/Isopropanol verrieben. Der Niederschlag wird abgesaugt, gewaschen und dann im Hochvakuum getrocknet. Man erhält 0,32 g der Titelverbindung mit Schmp. ab 182 °C Zersetzung.

20

AUSGANGSVERBINDUNGEN:**2,2-Bis{4-[4-(4-nitrophenyl)-1-piperazinylcarbonylmethoxy]phenyl}propan (28)**

2,5 g 4-[4-Carboxylmethoxyphenyl]-1-methyl-ethyl]phenoxyessigsäure werden in Toluol suspendiert und 1,6 ml Thionylchlorid zugegeben. Das Gemisch wird 5 Stunden unter Rückfluß
25 erhitzt und nach Abkühlen am Rotationsverdampfer eingeeengt. Es wird noch zweimal mit Toluol nachdestilliert und dann das erhaltene rohe Disäurechlorid in 50 ml abs. Dioxan gelöst. Es werden nacheinander 2,95 g 1-(4-Nitrophenyl)-piperazin, 2 ml Triethylamin und eine Spatelspitze 4-Dimethylaminopyridin zugegeben. Das Gemisch wird 2,5 h bei 50 °C gerührt. Nach
30 Abkühlen wird mit Wasser versetzt, der pH mit verdünnter Natronlauge auf 9 eingestellt. Das abgeschiedene Produkt wird durch Anreiben zur Kristallisation gebracht, abgesaugt, mit Wasser gewaschen und über Calciumchlorid getrocknet. Man erhält 4,7 g der Titelverbindung mit Schmp. ab 165 °C Zersetzung.

35 **4-[1-(4-Carboxymethoxyphenyl)-1-methyl-ethyl]-phenoxyessigsäure (29)**

6,7 g 4-[1-(4-Ethoxycarbonylmethoxyphenyl)-1-methyl-ethyl]phenoxyessigsäure-ethylester werden in 20 ml Methanol gelöst und 16,7 g 10 %-ige Natronlauge zugegeben. Das Gemisch wird

3 Stunden unter Rückfluß zum Sieden erhitzt, abgekühlt und dann das Methanol am Rotationsverdampfer abdestilliert. Es wird mit Wasser verdünnt, mit 2 N HCl auf pH 2 angesäuert und dann der farblose Niederschlag abgesaugt, mit Wasser gewaschen und im Vakuum über Calciumchlorid getrocknet. Man erhält 5,5 g der Titelverbindung mit Schmp. 177 - 179 °C.

5

4-[1-(4-Ethoxycarbonylmethoxyphenyl)-1-methyl-ethyl]phenoxyessigsäureethylester (30)

Ein Gemisch aus 10 g 4,4'-Isopropylidendiphenol, 10,7 ml Bromessigsäureethylester, 15,2 g Kaliumcarbonat und 1 Spatelspitze 18-Krone-6 in 180 ml Aceton wird in 4 Stunden unter Rückfluß zum Sieden erhitzt. Dann wird vom Feststoff abgesaugt, das Filtrat im Vakuum eingeeengt und der Rückstand mit 100 ml Diisopropylether versetzt. Es wird abgesaugt, mit wenig Diisopropylether gewaschen und getrocknet. Man erhält 15,5 g der Titelverbindung mit Schmp. 69 - 71 °C.

15

Beispiel 12:

ENDPRODUKT:

2,2-Bis-[4-(4-quanidiny-benzylamino)carbonylmethoxyphenyl]propan-dihydroacetat

20 **(31)**

(vgl. Fig. 17)

0,63 g 2,2-Bis-[4-(4-aminobenzylamino)carbonylmethoxyphenyl]propan in 10 ml abs. DMF werden nacheinander unter Rühren mit 0,88 g 1,3-Bis(benzyloxycarbonyl)-2-methylisothioharnstoff, 0,68 g Quecksilber(II)chlorid und 0,69 g Triethylamin versetzt. Das Gemisch wird 3 h bei Raumtemperatur gerührt, dann wird mit Ethylacetat verdünnt, vom entstandenen Niederschlag abgesaugt und das Filtrat einmal mit 5 %iger Sodalösung und zweimal mit Wasser gewaschen. Die Lösung wird über Magnesiumsulfat getrocknet, abgesaugt und das Filtrat im Vakuum zur Trockene eingedampft. Das Öl wird über eine Kieselgelsäule mit einem Gemisch aus Dichlormethan/Ethanol 95:5 chromatografiert. Die chromatografisch reinen Fraktionen werden vereinigt, eingeeengt und der Rückstand (0,9 g) in einem Gemisch aus 60 ml Tetrahydrofuran, 3 ml Methanol und 1 ml Eisessig gelöst. Nach Zugabe von 0,3 g Palladiumkohle (10 %) wird in einer Umlaufapparatur hydriert bis kein Ausgangsprodukt mehr nachweisbar ist. Es wird vom Katalysator abgesaugt und zur Trockene eingedampft. Das verbleibende zähe Öl wird mit THF verrührt, der entstandene Niederschlag abgesaugt, mit THF und Diethylether gewaschen und in Vakuum bei 80° C getrocknet. Man erhält 0,35 g der Titelverbindung mit Schmp. 135° (Zersetzung).

35

AUSGANGSVERBINDUNGEN:**2,2-Bis-[4-(4-aminobenzylamino)carbonylmethoxyphenyl]propan (32)**

- 5 1,8 g 2,2-Bis-[4-(4-nitrobenzylamino)carbonylmethoxyphenyl]propan werden in 300 ml THF gelöst und nach Zugabe von 0,5 g Palladiumkohle (10 %) in einer Umlaufapparatur hydriert bis kein Ausgangsprodukt mehr nachweisbar ist (DC). Nach Absaugen des Katalysators wird das Filtrat im Vakuum zur Trockene eingeeengt und der Rückstand über eine Kieselgelsäule mit einem Gemisch aus Dichlormethan/Ethanol 95:5 chromatografiert. Die chromatografisch
- 10 reinen Fraktionen werden vereint, eingeeengt und der Rückstand im Hochvakuum getrocknet. Man erhält 1,05 g der Titelverbindung in Form eines erstarrten Schaumes.

2,2-Bis-[4-(4-nitrobenzylamino)carbonylmethoxyphenyl]propan (33)

- 15 2 g 4-[1-(4-Carboxymethoxyphenyl)-1-methylethyl]-phenoxyessigsäure in 100 ml Toluol werden mit 1,5 ml Thionylchlorid versetzt und das Gemisch 5 h unter Rückfluß zum Sieden erhitzt. Nach Abkühlen wird am Rotationsverdampfer eingeeengt und noch zweimal mit Toluol nachdestilliert. Das so erhaltene Disäurechlorid wird in 40 ml abs. Dioxan gelöst, 2,2 g 4-
- 20 Nitrobenzylamin-hydrochlorid zugegeben und dann 3,5 ml Triethylamin zugetropft. Das Gemisch wird 2 h bei 50 °C gerührt und dann im Vakuum eingeeengt. Der nach Zugabe von Wasser entstandene Niederschlag wird abgesaugt, im Vakuum getrocknet und zur weiteren Reinigung über eine Kieselgelsäule mit Ethylacetat chromatografiert. Die chromatografisch
- 25 reinen Fraktionen werden vereint, eingeeengt und getrocknet. Man erhält 1,25 g der Titelverbindung als erstarrten Schaum.

Beispiel 13:

- 30 **ENDPRODUKT:**

2,2-Bis-[4-(10-amino-3,6-diaza-2,5-dioxodecyloxy)phenyl]propan-dihydrochlorid (34)

(vgl. Fig. 18)

- 0,77 g 2,2-Bis-[4-[10-(tert.butoxycarbonylamino)-3,6-diaza-2,5-dioxodecyloxy]phenyl]propan
- 35 werden in 10 ml abs. Dioxan gelöst und mit 2 ml einer ca. 4,8 M Lösung von Chlorwasserstoff in Dioxan versetzt. Es wird über Nacht gerührt, dann der entstandene Niederschlag abgesaugt, mit Dioxan und dann mit Diethylether gewaschen und bei 80° C im Vakuum getrocknet. Man erhält 0,58 g der Titelverbindung mit Schmp. 173° C (Zersetzung).

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

2,2-Bis-[4-(10-(tert.butoxycarbonylamino)-3,6-diaza-2,5-dioxodecyloxy)phenyl]propan5 (35)

0,67 g 2,2-Bis-(4-chlorcarbonylmethoxyphenyl)propan (hergestellt analog Beispiel 33) in 5 ml abs. Dioxan werden unter Rühren zu einer Lösung von 0,85 g N-[4-(tert.Butoxycarbonylamino)butyl]glycinamid und 0,42 Triethylamin in 10 ml abs. Dioxan
10 zugetropft. Die Mischung wird über Nacht gerührt, in Vakuum eingeengt und der Rückstand zwischen Wasser und Ethylacetat verteilt. Die organische Phase wird zweimal mit Wasser gewaschen, über Magnesiumsulfat getrocknet und eingeengt. Der Rückstand wird über eine Kieselgelsäule mit einem Gemisch aus Dichlormethan/Ethanol 95:5 chromatografiert. Die chromatografisch reinen Fraktionen werden vereint, eingeengt und der Rückstand mit
15 Diethylether/2-Propanol kristallisiert. Es wird abgesaugt, mit Diethylether gewaschen und in Vakuum getrocknet. Man erhält 0,77 g der Titelverbindung mit Schmp. 59° C (Zersetzung).

Beispiel 14:

20

ENDPRODUKT:

2,2-Bis-[4-[4-(4-aminomethylbenzylcarbamoyl)-1-piperazinylcarbonyloxy]phenyl]-propan-dihydrochlorid (36) (vgl. Fig. 19)

25 0,14 g 2,2-Bis-[4-[4-(4-tert.butoxycarbonylaminomethylbenzylcarbamoyl)-1-piperazinylcarbonyloxy]phenyl]propan werden in 2 ml abs. Dioxan gelöst und mit 2 ml einer ca. 20%igen Chlorwasserstoff-Lösung im Dioxan versetzt. Es wird über Nacht gerührt, abgesaugt, zweimal mit Diethylether gewaschen und im Vakuum getrocknet. Man erhält 0,08 g der Titelverbindung mit Schmp. ab 250° C (Zersetzung).

30

AUSGANGSVERBINDUNGEN:

2,2-Bis-[4-[4-(4-tert.butoxycarbonylaminomethylbenzylcarbamoyl)-1-piperazinylcarbonyloxy]phenyl]propan (37)

35

0,2 g 2,2-Bis-[4-(1-piperazinylcarbonyloxy)phenyl]propan-dihydrochlorid und 0,66 ml Diisopropylethylamin werden in 5 ml Dichlormethan gelöst und dann mit 0,4 ml einer 20%igen Phosgenlösung in Toluol versetzt. Nach 30 min Rühren bei Raumtemperatur

werden 0,18 g 4-(tert.Butoxycarbonylaminomethyl)benzylamin zugegeben und weitere 30 min. gerührt. Dann wird mit Wasser versetzt, die Phasen getrennt und die organische Phase noch zweimal mit Wasser gewaschen. Nach Trocknen über Magnesiumsulfat wird am Rotationsverdampfer eingeengt. Der Rückstand wird über eine Kieselgelsäule mit Dichlor-
5 methan/Methanol 95:5 als Laufmittel chromatografiert. Die chromatografisch reinen Fraktionen werden vereinigt und im Vakuum zur Trockene eingedampft. Man erhält 0,17 g der Titelverbindung als erstarrten Schaum.

2,2-Bis-[4-(1-piperazinylcarbonyloxy)phenyl]propan-dihydrochlorid (38)

10

8,3 g 2,2-Bis-[4-(4-tert.butoxycarbonyl-1-piperazinylcarbonyloxy)phenyl]propan-
dihydrochlorid werden in 50 ml abs. Dioxan gelöst und unter Rühren mit 9,5 ml einer ca.
20%igen Chlorwasserstoffsäure in Dioxan versetzt. Das Gemisch wird über Nacht gerührt,
mit Toluol verdünnt und der Niederschlag abgesaugt. Nach Trocknen im Vakuum erhält man
15 5,7 g der Titelverbindung mit Schmp. ab 200° C (Zersetzung).

2,2-Bis-[4-(4-tert.butoxycarbonyl-1-piperazinylcarbonyloxy)phenyl]propan (39)

5 g Bisphenol A-bis(chloroformat) werden in 50 ml Dichlormethan gelöst und unter Eiskühlung
20 7,3 ml Diisopropylethylamin und 6,6 g 1-tert.Butoxycarbonylpiperazin zugegeben. Die Mischung
wird 1h bei Raumtemperatur gerührt und dann dreimal mit eiskalter 0,5 N Salzsäurelösung und
zweimal mit 1 N Natronlauge extrahiert. Nach Trocknen mit Magnesiumsulfat wird am
Rotationsverdampfer eingedampft und der Feststoff im Vakuum getrocknet.
Man erhält 8,4 g der Titelverbindung mit Schmp. 171–172 °C.

25

Beispiel 15:

Biologische Untersuchungen

30

Die dokumentierten pathophysiologischen Effekte der Mastzell-Tryptase werden direkt durch
die enzymatische Aktivität der Protease bewirkt. Dementsprechend werden sie durch Inhibito-
ren, die die enzymatische Aktivität der Tryptase hemmen, reduziert bzw. blockiert. Ein
geeignetes Maß für die Affinität eines reversiblen Inhibitors zur Zielprotease ist die Gleichge-
35 wichts-Dissoziationskonstante K_i des Enzym-Inhibitor-Komplexes. Dieser K_i -Wert kann über
den Einfluss des Inhibitors auf die Tryptase-induzierte Spaltung eines chromogenen Peptid-p-
Nitroanilid-Substrates bestimmt werden.

Methodik

Die Dissoziationskonstanten für die Trypsase-Inhibitor-Komplexe werden unter Gleichgewichtsbedingungen entsprechend den allgemeinen Vorschlägen von Bieth (Bieth JG, Pathophysiological Interpretation of kinetic constants of protease inhibitors, Bull. Europ. Physiopath. Resp.

- 5 16:183-195, 1980) und den Methoden von Sommerhoff et al. (Sommerhoff CP et al., A Kazal-type inhibitor of human mast cell tryptase: Isolation from the medical leech *Hirudo medicinalis*, characterization, and sequence analysis, Biol. Chem. Hoppe-Seyler 375: 685-694, 1994) bestimmt.

- 10 Menschliche Trypsase wird aus Lungengewebe rein dargestellt; die mittels Titration bestimmte spezifische Aktivität der isolierten Protease beträgt üblicherweise 85 % des theoretischen Wertes. Konstante Mengen der Trypsase werden in Gegenwart von 50 µg/ml Heparin zur Stabilisierung der Protease mit aufsteigenden Mengen der Inhibitoren inkubiert. Nach Gleichgewichtseinstellung zwischen den Reaktionspartnern wird die verbleibende Enzymaktivität nach
- 15 Zugabe des Peptid-p-Nitroanilid-Substrates tos-Gly-Pro-Arg-pNA bestimmt, dessen Spaltung über 3 min bei 405 nm verfolgt wird. Alternativ kann die enzymatische Restaktivität auch mit fluorogenen Substraten bestimmt werden. Die apparenten Dissoziationskonstanten K_{iapp} (d.h. in der Gegenwart von Substrat) werden anschließend durch Anpassung der Enzymgeschwindigkeiten an die allgemeine Gleichung für reversible Inhibitoren (Morrison JF, Kinetics of the
- 20 reversible inhibition of enzyme-catalysed reactions by tight-binding inhibitors, Biochim. Biophys. Acta 185, 269-286, 1969) mittels nicht linearer Regression ermittelt:

$$V_i/V_0 = 1 - \{E_t + I_t + K_{iapp} - [(E_t + I_t + K_{iapp})^2 - 4E_t I_t]^{1/2}\} / 2E_t$$

- 25 Dabei sind V_i und V_0 die Geschwindigkeiten in der Gegenwart bzw. Abwesenheit des Inhibitors und E_t und I_t die Konzentrationen der Trypsase und des Inhibitors.

Die für die erfindungsgemäßen Verbindungen ermittelten apparenten Dissoziationskonstanten ergeben sich aus der folgenden Tabelle A, in der die Nummern der Verbindungen den

- 30 Nummern der Verbindungen in den Beispielen entsprechen.

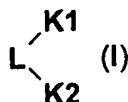
Tabelle A

Hemmung der humanen Tryptase

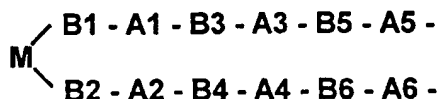
Verbindung	K _{iapp} (µM)
1	3
11	0,03
15	3
17	22
21	0,1
23	0,8
31	0,2
34	2
36	0,028

Patentansprüche

1. Bifunktionelle Inhibitoren von humaner Trypsase der Formel I

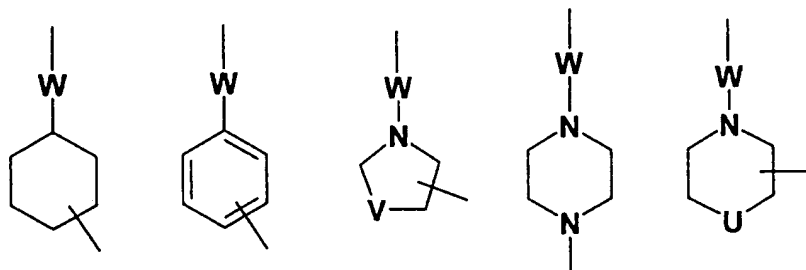


- 5 dadurch gekennzeichnet,
dass die beiden Kopfgruppen K1 und K2 gleich oder verschieden sind und jeweils eine Gruppe Q umfassen, die mit einer Carboxylatgruppe Wechselwirkungen eingehen kann,
der Linker L eine Konformation einnehmen kann, so daß die Gruppen Q der beiden Kopfgruppen in einem Abstand von 20 bis 45 Å vorliegen,
- 10 die Ausmaße der Kopfgruppen und des Linkers das Eindringen des Inhibitors in einen Hohlraum mit den Dimensionen 52 Å x 32 Å x 40 Å erlauben, und
L für



steht, worin

- 15 A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,
- A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind
- 20 aus der Gruppe



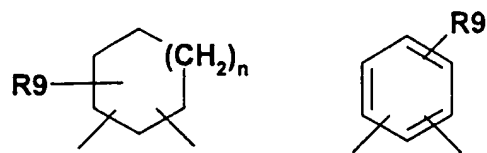
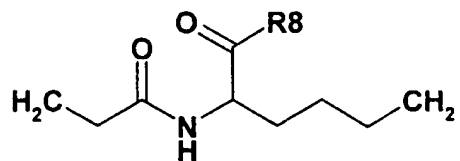
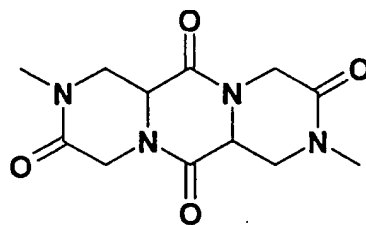
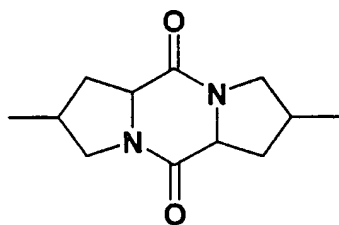
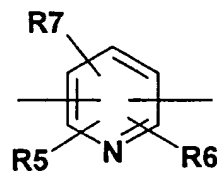
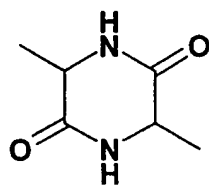
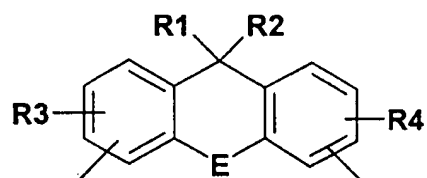
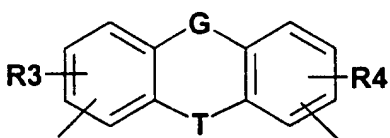
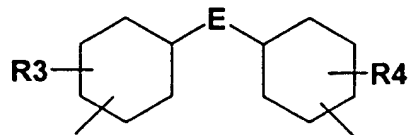
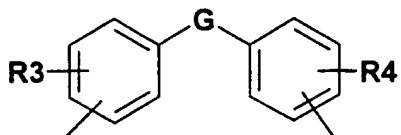
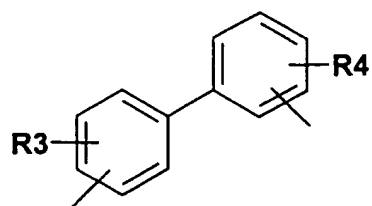
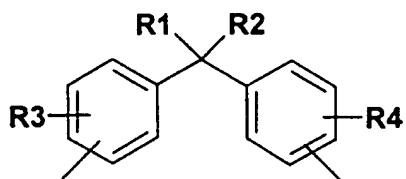
wobei

- U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),
V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen) bedeutet, und
W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen

-74-

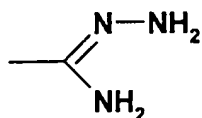
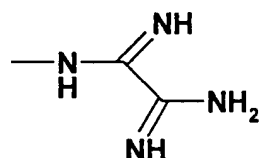
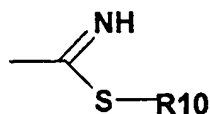
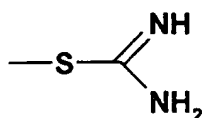
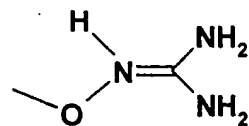
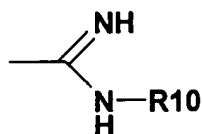
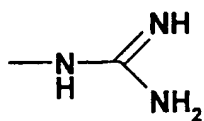
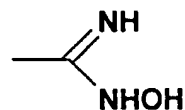
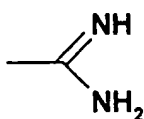


-75-

wobei

- R1 und R2 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl oder Hydroxy bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind
- 5 -C(O)- bedeuten oder einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,
- R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
- E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
- 10 G -S-, -O- oder -S(O)₂- bedeutet,
- I -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
- R5 und R6 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
- R7 Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, Phenyl oder Pyridyl bedeutet,
- R8 1-4C-Alkoxy, N(R81)R82, Piperidino oder Morpholino bedeutet,
- 15 R81 und R82 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
- R9 Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeutet,
- n 0, 1, 2 oder 3 bedeutet,
- K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
- 20 K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
- B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,
- B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,
- 25 m 0 oder 1 bedeutet,
- p 0 oder 1 bedeutet,
- X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind

-76-



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Heterocycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor oder Protonendonator fungieren kann, stehen,

5

Z1 und Z2 gleich oder verschieden sind und 5-12C-Arylen, 5-12C-Heteroarylen, 3-8C-Cycloalkylen oder 3-8C-Heterocycloalkylen bedeuten,

wobei jedes Arylen, Heteroarylen, Cycloalkylen, Heterocycloalkylen, Heteroaryl oder Heterocycloalkyl zusätzlich seinerseits durch ein, zwei oder drei Substituenten ausgewählt aus der Gruppe Hydroxy, Halogen, Nitro, Cyano, Amino, 1-4C-Alkyl, 1-4C-Alkoxy, 1-4C-Alkoxycarbonyl, 1-4C-Alkylcarbonyloxy, Carboxyl oder Aminocarbonyl substituiert sein kann,

10

die Salze dieser Verbindungen, sowie die N-Oxide der ein Stickstoffatom enthaltenden Heteroaryle, Heterocycloalkyle, Heteroarylene und Heterocycloalkylene und deren Salze,

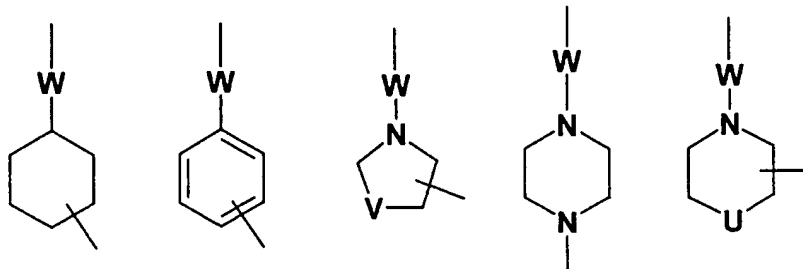
15

wobei alle diejenigen Verbindungen ausgeschlossen sind, bei denen eine oder mehrere der Variablen B1, B2, B3, B4, B5, B6, B7, B8, B9, B10, B11 oder B12 die Bedeutung einer Bindung annehmen und es dadurch zur direkten Verknüpfung zweier Heteroatome, zweier Carbonylgruppen oder einer Carbonyl- und einer Thiocarbonylgruppe kommen würde.

2. Inhibitoren nach Anspruch 1, worin

A1 und A2 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel), -S(O)₂-, -S(O)₂-NH-, -NH-S(O)₂-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

5 A3 und A4 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -C(S)-, -O-, -S-, -NH-, -O-C(O)-, -C(O)-O-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)- oder eine Bindung bedeuten, oder ausgewählt sind aus der Gruppe



wobei

U -O- (Sauerstoff) oder -CH₂- (Methylen),

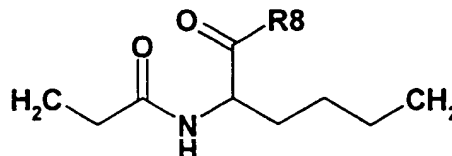
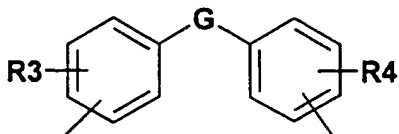
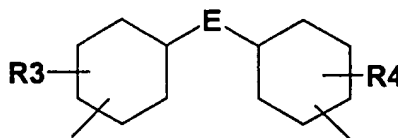
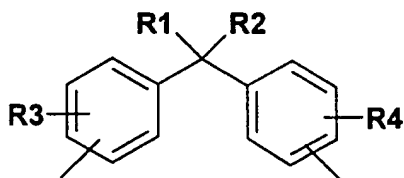
10 V -O- (Sauerstoff), -S- (Schwefel) oder -CH₂- (Methylen), und

W die Gruppe -C(O)- oder eine Bindung bedeutet,

A5 und A6 gleich oder verschieden sind und -C(O)-, -NH-, -O-, -S-, -C(O)-NH-, -NH-C(O)-, -O-C(O)-, -C(O)-O- oder eine Bindung bedeuten,

M ausgewählt ist aus einer der nachfolgenden Gruppen

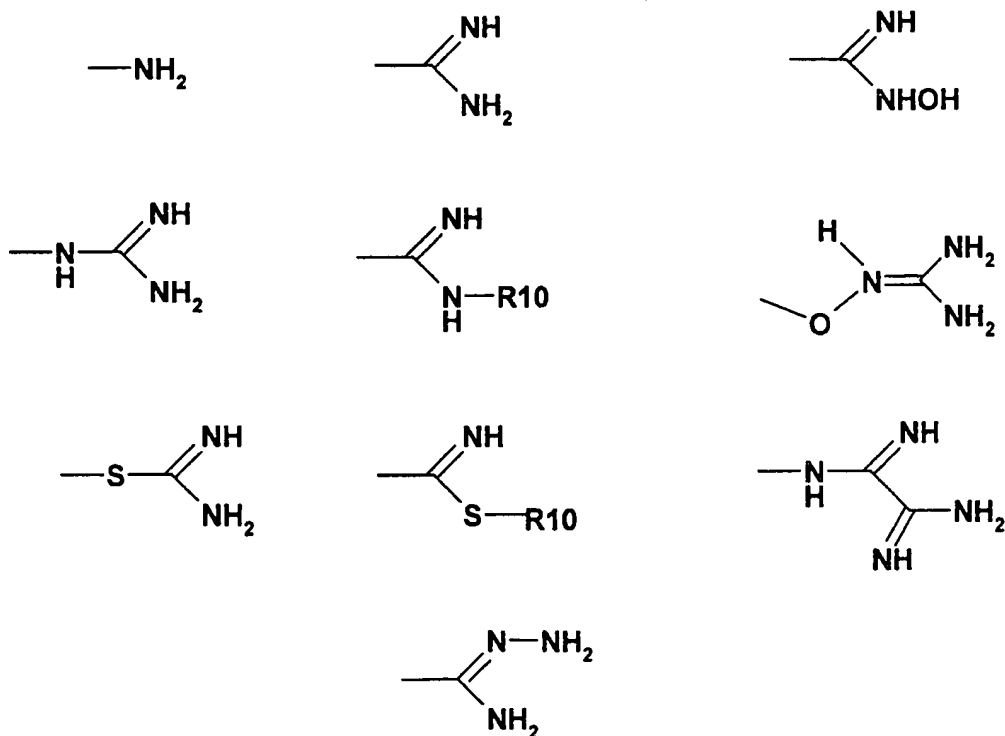
15



wobei

R1 und R2 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff, 1-4C-Alkyl, ganz oder teilweise durch Fluor substituiertes 1-4C-Alkyl oder Hydroxy bedeuten, oder R1 und R2 gemeinsam und unter Einschluß des Kohlenstoffatoms an das sie gebunden sind
20 -C(O)- bedeuten oder einen 5- oder 6-gliedrigen, gewünschtenfalls substituierten cyclischen Kohlenwasserstoff darstellen,

- R3 und R4 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder ein, zwei oder drei gleiche oder verschiedene 1-4C-Alkylreste bedeuten,
- E -CH₂-, -O- oder eine Bindung bedeutet,
- G -S-, -O- oder -S(O)₂- bedeutet,
- 5 R8 1-4C-Alkoxy, N(81)R82, Piperidino oder Morpholino bedeutet,
R81 und R82 gleich oder verschieden sind und Wasserstoff oder 1-4C-Alkyl bedeuten,
- K1 -B7-(C(O))_m-B9-X1, -B7-(C(O))_m-B9-Y1 oder -B7-(C(O))_m-B9-Z1-B11-X1 bedeutet,
- K2 -B8-(C(O))_p-B10-X2, -B8-(C(O))_p-B10-Y2 oder -B8-(C(O))_p-B10-Z2-B12-X2 bedeutet,
- B1, B2, B3, B4, B5 und B6 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-4C-Alkylen bedeuten,
- 10 B7, B8, B9, B10, B11 und B12 gleich oder verschieden sind und eine Bindung oder 1-3C-Alkylen bedeuten,
- m 0 oder 1 bedeutet,
- p 0 oder 1 bedeutet,
- 15 X1 und X2 gleich oder verschieden und ausgewählt aus den nachfolgenden Gruppen sind



wobei

R10 1-4C-Alkyl bedeutet,

- Y1 und Y2 gleich oder verschieden sind und für einen 4-11C-Heteroaryl- oder 2-7C-Heterocycloalkylrest, enthaltend mindestens einen Ringstickstoff, der als Protonenakzeptor oder Protonendonator fungieren kann, stehen,
- 20

ATOM	611	H	GLN	71	-13.081	28.911	0.512	1.00	0.00
ATOM	612	HE21	GLN	71	-12.037	29.653	-5.618	1.00	0.00
ATOM	613	HE22	GLN	71	-12.168	28.043	-6.158	1.00	0.00
ATOM	614	N	HIS	72	-11.123	26.375	-0.120	1.00	20.03
ATOM	615	CA	HIS	72	-10.071	25.355	-0.044	1.00	19.17
ATOM	616	C	HIS	72	-10.131	24.631	1.290	1.00	18.35
ATOM	617	O	HIS	72	-9.950	25.235	2.338	1.00	19.70
ATOM	618	CB	HIS	72	-8.682	25.982	-0.244	1.00	17.61
ATOM	619	CG	HIS	72	-8.401	26.399	-1.655	1.00	15.96
ATOM	620	ND1	HIS	72	-8.205	25.491	-2.671	1.00	16.94
ATOM	621	CD2	HIS	72	-8.296	27.623	-2.223	1.00	16.08
ATOM	622	CE1	HIS	72	-7.995	26.135	-3.806	1.00	16.70
ATOM	623	NE2	HIS	72	-8.046	27.431	-3.561	1.00	16.59
ATOM	624	H	HIS	72	-11.383	26.777	0.736	1.00	0.00
ATOM	625	HD1	HIS	72	-8.222	24.518	-2.533	1.00	0.00
ATOM	626	HE2	HIS	72	-7.969	28.083	-4.294	1.00	0.00
ATOM	627	N	LEU	73	-10.371	23.330	1.244	1.00	17.32
ATOM	628	CA	LEU	73	-10.476	22.537	2.455	1.00	18.76
ATOM	629	C	LEU	73	-9.246	22.514	3.333	1.00	22.16
ATOM	630	O	LEU	73	-8.115	22.469	2.839	1.00	24.82
ATOM	631	CB	LEU	73	-10.806	21.094	2.110	1.00	18.94
ATOM	632	CG	LEU	73	-12.248	20.683	1.871	1.00	18.81
ATOM	633	CD1	LEU	73	-12.257	19.215	1.533	1.00	17.74
ATOM	634	CD2	LEU	73	-13.085	20.951	3.114	1.00	19.33
ATOM	635	H	LEU	73	-10.461	22.916	0.364	1.00	0.00
ATOM	636	N	TYR	74	-9.482	22.509	4.641	1.00	23.85
ATOM	637	CA	TYR	74	-8.418	22.410	5.639	1.00	26.21
ATOM	638	C	TYR	74	-7.565	23.648	5.843	1.00	28.99
ATOM	639	O	TYR	74	-6.861	23.764	6.850	1.00	28.06
ATOM	640	CB	TYR	74	-7.531	21.203	5.327	1.00	25.42
ATOM	641	CG	TYR	74	-8.310	19.913	5.213	1.00	24.73
ATOM	642	CD1	TYR	74	-8.242	19.127	4.066	1.00	24.41
ATOM	643	CD2	TYR	74	-9.117	19.477	6.259	1.00	24.55
ATOM	644	CE1	TYR	74	-8.962	17.931	3.972	1.00	24.16
ATOM	645	CE2	TYR	74	-9.835	18.296	6.172	1.00	24.01
ATOM	646	CZ	TYR	74	-9.753	17.529	5.034	1.00	23.90
ATOM	647	OH	TYR	74	-10.460	16.355	4.986	1.00	24.94
ATOM	648	H	TYR	74	-10.400	22.700	4.941	1.00	0.00
ATOM	649	HH	TYR	74	-10.745	16.249	5.896	1.00	0.00
ATOM	650	N	TYR	75	-7.616	24.566	4.888	1.00	33.29
ATOM	651	CA	TYR	75	-6.858	25.799	4.983	1.00	38.52
ATOM	652	C	TYR	75	-7.854	26.852	5.445	1.00	40.33
ATOM	653	O	TYR	75	-8.827	27.122	4.743	1.00	42.11
ATOM	654	CB	TYR	75	-6.311	26.172	3.608	1.00	43.34
ATOM	655	CG	TYR	75	-5.257	27.257	3.624	1.00	48.90
ATOM	656	CD1	TYR	75	-4.230	27.237	4.566	1.00	51.16
ATOM	657	CD2	TYR	75	-5.272	28.293	2.681	1.00	50.46
ATOM	658	CE1	TYR	75	-3.244	28.213	4.575	1.00	52.90
ATOM	659	CE2	TYR	75	-4.282	29.277	2.682	1.00	52.70
ATOM	660	CZ	TYR	75	-3.271	29.226	3.635	1.00	53.28
ATOM	661	OH	TYR	75	-2.268	30.166	3.654	1.00	55.24
ATOM	662	H	TYR	75	-8.234	24.493	4.132	1.00	0.00
ATOM	663	HH	TYR	75	-1.763	30.054	4.464	1.00	0.00
ATOM	664	N	GLN	79	-7.604	27.444	6.612	1.00	40.07
ATOM	665	CA	GLN	79	-8.487	28.465	7.190	1.00	40.38
ATOM	666	C	GLN	79	-9.684	27.832	7.920	1.00	38.64
ATOM	667	O	GLN	79	-10.735	28.466	8.081	1.00	39.81
ATOM	668	CB	GLN	79	-8.996	29.447	6.111	1.00	42.74
ATOM	669	CG	GLN	79	-7.931	30.318	5.448	1.00	46.37
ATOM	670	CD	GLN	79	-7.771	31.671	6.129	1.00	49.21
ATOM	671	OE1	GLN	79	-7.180	31.775	7.206	1.00	51.15
ATOM	672	NE2	GLN	79	-8.304	32.715	5.502	1.00	49.52
ATOM	673	H	GLN	79	-6.807	27.165	7.100	1.00	0.00

ATOM	674	HE21GLN	79	-8.771	32.562	4.658	1.00	0.00
ATOM	675	HE22GLN	79	-8.188	33.583	5.939	1.00	0.00
ATOM	676	N ASP	80	-9.510	26.601	8.390	1.00	35.73
ATOM	677	CA ASP	80	-10.571	25.887	9.100	1.00	34.10
ATOM	678	C ASP	80	-11.075	26.641	10.330	1.00	33.62
ATOM	679	O ASP	80	-10.312	27.332	11.005	1.00	33.62
ATOM	680	CB ASP	80	-10.087	24.498	9.522	1.00	33.12
ATOM	681	CG ASP	80	-10.660	23.377	8.666	1.00	30.78
ATOM	682	OD1 ASP	80	-10.736	22.246	9.179	1.00	30.93
ATOM	683	OD2 ASP	80	-11.025	23.595	7.496	1.00	28.71
ATOM	684	H ASP	80	-8.660	26.148	8.245	1.00	0.00
ATOM	685	N GLN	81	-12.365	26.495	10.613	1.00	33.72
ATOM	686	CA GLN	81	-13.009	27.145	11.757	1.00	33.44
ATOM	687	C GLN	81	-14.191	26.240	12.097	1.00	30.54
ATOM	688	O GLN	81	-15.320	26.467	11.658	1.00	30.41
ATOM	689	CB GLN	81	-13.483	28.551	11.357	1.00	36.68
ATOM	690	CG GLN	81	-13.389	29.596	12.474	1.00	40.37
ATOM	691	CD GLN	81	-12.982	30.985	11.971	1.00	41.54
ATOM	692	OE1 GLN	81	-13.248	31.995	12.624	1.00	41.99
ATOM	693	NE2 GLN	81	-12.313	31.033	10.823	1.00	41.82
ATOM	694	H GLN	81	-12.900	25.932	10.012	1.00	0.00
ATOM	695	HE21GLN	81	-12.086	30.226	10.311	1.00	0.00
ATOM	696	HE22GLN	81	-12.063	31.933	10.537	1.00	0.00
ATOM	697	N LEU	82	-13.905	25.201	12.871	1.00	27.16
ATOM	698	CA LEU	82	-14.889	24.192	13.238	1.00	25.21
ATOM	699	C LEU	82	-15.956	24.546	14.278	1.00	24.92
ATOM	700	O LEU	82	-15.653	25.043	15.362	1.00	25.74
ATOM	701	CB LEU	82	-14.151	22.910	13.625	1.00	24.18
ATOM	702	CG LEU	82	-13.484	22.068	12.519	1.00	23.08
ATOM	703	CD1 LEU	82	-13.434	22.791	11.179	1.00	23.13
ATOM	704	CD2 LEU	82	-12.093	21.656	12.956	1.00	21.60
ATOM	705	H LEU	82	-13.004	25.116	13.239	1.00	0.00
ATOM	706	N LEU	83	-17.205	24.239	13.937	1.00	23.29
ATOM	707	CA LEU	83	-18.365	24.504	14.782	1.00	23.01
ATOM	708	C LEU	83	-18.968	23.190	15.295	1.00	25.00
ATOM	709	O LEU	83	-19.281	22.293	14.505	1.00	26.30
ATOM	710	CB LEU	83	-19.430	25.224	13.958	1.00	21.83
ATOM	711	CG LEU	83	-19.050	26.463	13.154	1.00	20.51
ATOM	712	CD1 LEU	83	-19.941	26.572	11.929	1.00	20.74
ATOM	713	CD2 LEU	83	-19.173	27.691	14.017	1.00	20.24
ATOM	714	H LEU	83	-17.375	23.844	13.064	1.00	0.00
ATOM	715	N PRO	84	-19.155	23.058	16.621	1.00	25.46
ATOM	716	CA PRO	84	-19.727	21.829	17.182	1.00	24.91
ATOM	717	C PRO	84	-21.213	21.666	16.850	1.00	25.60
ATOM	718	O PRO	84	-21.914	22.643	16.585	1.00	25.04
ATOM	719	CB PRO	84	-19.479	22.000	18.676	1.00	24.22
ATOM	720	CG PRO	84	-19.588	23.482	18.861	1.00	24.55
ATOM	721	CD PRO	84	-18.802	24.007	17.692	1.00	25.52
ATOM	722	N VAL	85	-21.684	20.425	16.869	1.00	27.16
ATOM	723	CA VAL	85	-23.074	20.120	16.553	1.00	28.55
ATOM	724	C VAL	85	-23.908	19.821	17.793	1.00	30.63
ATOM	725	O VAL	85	-23.676	18.833	18.491	1.00	32.61
ATOM	726	CB VAL	85	-23.170	18.934	15.568	1.00	27.90
ATOM	727	CG1 VAL	85	-24.607	18.456	15.435	1.00	28.88
ATOM	728	CG2 VAL	85	-22.644	19.357	14.208	1.00	29.34
ATOM	729	H VAL	85	-21.105	19.676	17.121	1.00	0.00
ATOM	730	N SER	86	-24.911	20.660	18.025	1.00	30.56
ATOM	731	CA SER	86	-25.808	20.535	19.166	1.00	29.15
ATOM	732	C SER	86	-26.830	19.400	19.079	1.00	28.49
ATOM	733	O SER	86	-27.235	18.855	20.106	1.00	28.98
ATOM	734	CB SER	86	-26.535	21.863	19.379	1.00	30.43
ATOM	735	OG SER	86	-27.681	21.727	20.201	1.00	32.21
ATOM	736	H SER	86	-25.070	21.384	17.397	1.00	0.00

ATOM	737	HG	SER	86	-27.507	21.131	20.938	1.00	0.00
ATOM	738	N	ARG	87	-27.250	19.029	17.876	1.00	27.18
ATOM	739	CA	ARG	87	-28.255	17.982	17.764	1.00	25.82
ATOM	740	C	ARG	87	-28.304	17.379	16.378	1.00	23.86
ATOM	741	O	ARG	87	-28.177	18.088	15.385	1.00	24.82
ATOM	742	CB	ARG	87	-29.611	18.579	18.130	1.00	27.87
ATOM	743	CG	ARG	87	-30.763	17.612	18.209	1.00	31.25
ATOM	744	CD	ARG	87	-31.804	18.129	19.194	1.00	33.08
ATOM	745	NE	ARG	87	-32.101	19.544	18.986	1.00	35.62
ATOM	746	CZ	ARG	87	-33.310	20.035	18.728	1.00	37.75
ATOM	747	NH1	ARG	87	-34.358	19.220	18.645	1.00	38.48
ATOM	748	NH2	ARG	87	-33.465	21.344	18.538	1.00	38.20
ATOM	749	H	ARG	87	-26.909	19.486	17.083	1.00	0.00
ATOM	750	HE	ARG	87	-31.355	20.209	19.029	1.00	0.00
ATOM	751	HH11	ARG	87	-34.227	18.237	18.780	1.00	0.00
ATOM	752	HH12	ARG	87	-35.276	19.561	18.448	1.00	0.00
ATOM	753	HH21	ARG	87	-32.629	21.934	18.565	1.00	0.00
ATOM	754	HH22	ARG	87	-34.305	21.936	18.312	1.00	0.00
ATOM	755	N	ILE	88	-28.476	16.064	16.320	1.00	21.59
ATOM	756	CA	ILE	88	-28.544	15.353	15.052	1.00	20.21
ATOM	757	C	ILE	88	-29.915	14.727	14.929	1.00	19.59
ATOM	758	O	ILE	88	-30.256	13.816	15.677	1.00	20.48
ATOM	759	CB	ILE	88	-27.482	14.230	14.969	1.00	19.70
ATOM	760	CG1	ILE	88	-26.078	14.824	15.045	1.00	17.67
ATOM	761	CG2	ILE	88	-27.640	13.443	13.679	1.00	19.91
ATOM	762	H	ILE	88	-28.574	15.534	17.132	1.00	0.00
ATOM	763	CD	ILE	88	-25.001	13.807	14.868	1.00	17.79
ATOM	764	N	ILE	89	-30.713	15.223	14.000	1.00	19.07
ATOM	765	CA	ILE	89	-32.051	14.691	13.810	1.00	19.44
ATOM	766	C	ILE	89	-32.087	13.962	12.484	1.00	20.82
ATOM	767	O	ILE	89	-32.102	14.583	11.424	1.00	22.94
ATOM	768	CB	ILE	89	-33.095	15.813	13.807	1.00	18.56
ATOM	769	CG1	ILE	89	-33.022	16.594	15.114	1.00	17.07
ATOM	770	CG2	ILE	89	-34.479	15.238	13.613	1.00	18.47
ATOM	771	H	ILE	89	-30.385	15.934	13.407	1.00	0.00
ATOM	772	CD	ILE	89	-33.865	17.829	15.114	1.00	16.99
ATOM	773	N	VAL	90	-32.046	12.642	12.538	1.00	20.90
ATOM	774	CA	VAL	90	-32.065	11.843	11.324	1.00	21.39
ATOM	775	C	VAL	90	-33.493	11.364	11.092	1.00	22.46
ATOM	776	O	VAL	90	-34.143	10.891	12.022	1.00	24.16
ATOM	777	CB	VAL	90	-31.103	10.655	11.452	1.00	20.39
ATOM	778	CG1	VAL	90	-31.174	9.775	10.221	1.00	22.04
ATOM	779	CG2	VAL	90	-29.687	11.163	11.660	1.00	19.57
ATOM	780	H	VAL	90	-32.032	12.196	13.411	1.00	0.00
ATOM	781	N	HIS	91	-33.982	11.494	9.863	1.00	21.62
ATOM	782	CA	HIS	91	-35.342	11.090	9.546	1.00	21.27
ATOM	783	C	HIS	91	-35.671	9.705	10.080	1.00	24.29
ATOM	784	O	HIS	91	-35.018	8.729	9.728	1.00	26.00
ATOM	785	CB	HIS	91	-35.591	11.127	8.050	1.00	19.12
ATOM	786	CG	HIS	91	-37.038	11.055	7.697	1.00	18.43
ATOM	787	ND1	HIS	91	-37.848	12.170	7.659	1.00	19.05
ATOM	788	CD2	HIS	91	-37.842	9.999	7.438	1.00	18.81
ATOM	789	CE1	HIS	91	-39.089	11.804	7.396	1.00	19.27
ATOM	790	NE2	HIS	91	-39.112	10.491	7.259	1.00	20.03
ATOM	791	H	HIS	91	-33.413	11.823	9.134	1.00	0.00
ATOM	792	HD1	HIS	91	-37.556	13.103	7.789	1.00	0.00
ATOM	793	HE2	HIS	91	-39.916	9.963	7.018	1.00	0.00
ATOM	794	N	PRO	92	-36.764	9.595	10.856	1.00	25.65
ATOM	795	CA	PRO	92	-37.272	8.371	11.489	1.00	25.80
ATOM	796	C	PRO	92	-37.663	7.213	10.583	1.00	25.25
ATOM	797	O	PRO	92	-37.997	6.137	11.067	1.00	25.72
ATOM	798	CB	PRO	92	-38.480	8.874	12.280	1.00	25.50
ATOM	799	CG	PRO	92	-38.958	10.024	11.452	1.00	26.33

ATOM	800	CD	PRO	92	-37.667	10.725	11.138	1.00	26.34
ATOM	801	N	GLN	93	-37.607	7.411	9.275	1.00	24.91
ATOM	802	CA	GLN	93	-37.986	6.342	8.365	1.00	25.03
ATOM	803	C	GLN	93	-36.799	5.914	7.522	1.00	23.48
ATOM	804	O	GLN	93	-36.928	5.091	6.614	1.00	23.84
ATOM	805	CB	GLN	93	-39.137	6.797	7.467	1.00	27.86
ATOM	806	CG	GLN	93	-39.907	5.652	6.830	1.00	32.58
ATOM	807	CD	GLN	93	-41.337	5.550	7.334	1.00	34.52
ATOM	808	OE1	GLN	93	-42.279	5.524	6.538	1.00	35.99
ATOM	809	NE2	GLN	93	-41.508	5.487	8.650	1.00	35.14
ATOM	810	H	GLN	93	-37.226	8.231	8.932	1.00	0.00
ATOM	811	HE21	GLN	93	-40.750	5.500	9.270	1.00	0.00
ATOM	812	HE22	GLN	93	-42.422	5.421	9.002	1.00	0.00
ATOM	813	N	PHE	94	-35.635	6.462	7.845	1.00	21.31
ATOM	814	CA	PHE	94	-34.433	6.154	7.105	1.00	13.60
ATOM	815	C	PHE	94	-33.709	4.931	7.607	1.00	19.15
ATOM	816	O	PHE	94	-33.532	4.739	8.809	1.00	19.49
ATOM	817	CB	PHE	94	-33.468	7.343	7.117	1.00	16.76
ATOM	818	CG	PHE	94	-32.115	7.031	6.532	1.00	16.50
ATOM	819	CD1	PHE	94	-31.952	6.873	5.157	1.00	16.91
ATOM	820	CD2	PHE	94	-31.012	6.840	7.356	1.00	15.00
ATOM	821	CE1	PHE	94	-30.712	6.523	4.613	1.00	15.04
ATOM	822	CE2	PHE	94	-29.778	6.492	6.820	1.00	14.09
ATOM	823	CZ	PHE	94	-29.631	6.332	5.445	1.00	13.44
ATOM	824	H	PHE	94	-35.514	7.063	8.608	1.00	0.00
ATOM	825	N	TYR	95	-33.337	4.080	6.665	1.00	20.32
ATOM	826	CA	TYR	95	-32.548	2.903	6.955	1.00	20.78
ATOM	827	C	TYR	95	-31.482	2.744	5.864	1.00	22.99
ATOM	828	O	TYR	95	-30.344	2.374	6.153	1.00	23.36
ATOM	829	CB	TYR	95	-33.379	1.631	7.039	1.00	19.68
ATOM	830	CG	TYR	95	-32.487	0.500	7.478	1.00	21.06
ATOM	831	CD1	TYR	95	-31.796	0.585	8.687	1.00	22.14
ATOM	832	CD2	TYR	95	-32.232	-0.591	6.652	1.00	20.20
ATOM	833	CE1	TYR	95	-30.868	-0.371	9.063	1.00	20.28
ATOM	834	CE2	TYR	95	-31.296	-1.562	7.022	1.00	19.85
ATOM	835	CZ	TYR	95	-30.618	-1.434	8.234	1.00	19.61
ATOM	836	OH	TYR	95	-29.671	-2.350	8.613	1.00	20.26
ATOM	837	H	TYR	95	-33.634	4.272	5.751	1.00	0.00
ATOM	838	HH	TYR	95	-29.220	-2.102	9.428	1.00	0.00
ATOM	839	N	THR	96	-31.844	3.059	4.620	1.00	24.27
ATOM	840	CA	THR	96	-30.937	2.946	3.480	1.00	24.65
ATOM	841	C	THR	96	-31.291	3.982	2.423	1.00	24.64
ATOM	842	O	THR	96	-32.441	4.414	2.323	1.00	25.67
ATOM	843	CB	THR	96	-31.057	1.552	2.819	1.00	26.28
ATOM	844	OG1	THR	96	-30.662	0.534	3.746	1.00	29.19
ATOM	845	CG2	THR	96	-30.197	1.451	1.576	1.00	27.15
ATOM	846	H	THR	96	-32.755	3.375	4.424	1.00	0.00
ATOM	847	HG1	THR	96	-30.132	0.910	4.470	1.00	0.00
ATOM	848	N	ALA	97	-30.303	4.358	1.616	1.00	23.80
ATOM	849	CA	ALA	97	-30.509	5.316	0.537	1.00	21.68
ATOM	850	C	ALA	97	-31.517	4.776	-0.473	1.00	19.74
ATOM	851	O	ALA	97	-32.474	5.458	-0.799	1.00	20.20
ATOM	852	CB	ALA	97	-29.188	5.625	-0.153	1.00	22.02
ATOM	853	H	ALA	97	-29.401	4.013	1.756	1.00	0.00
ATOM	854	N	GLN	98	-31.320	3.542	-0.938	1.00	18.47
ATOM	855	CA	GLN	98	-32.229	2.937	-1.914	1.00	18.65
ATOM	856	C	GLN	98	-33.658	2.880	-1.422	1.00	13.60
ATOM	857	O	GLN	98	-34.596	2.993	-2.205	1.00	18.49
ATOM	858	CB	GLN	98	-31.817	1.514	-2.277	1.00	13.52
ATOM	859	CG	GLN	98	-30.435	1.369	-2.838	1.00	21.00
ATOM	860	CD	GLN	98	-29.409	1.347	-1.757	1.00	22.65
ATOM	861	OE1	GLN	98	-28.723	2.335	-1.524	1.00	24.35
ATOM	862	NE2	GLN	98	-29.340	0.236	-1.031	1.00	24.36

ATOM	863	H	GLN	98	-30.515	3.078	-0.638	1.00	0.00
ATOM	864	HE21	GLN	98	-29.971	-0.487	-1.229	1.00	0.00
ATOM	865	HE22	GLN	98	-28.636	0.202	-0.349	1.00	0.00
ATOM	866	N	ILE	99	-33.821	2.639	-0.130	1.00	19.53
ATOM	867	CA	ILE	99	-35.146	2.548	0.452	1.00	20.09
ATOM	868	C	ILE	99	-35.808	3.916	0.417	1.00	20.67
ATOM	869	O	ILE	99	-37.001	4.014	0.140	1.00	23.92
ATOM	870	CB	ILE	99	-35.104	1.989	1.892	1.00	20.58
ATOM	871	CG1	ILE	99	-34.840	0.478	1.881	1.00	20.42
ATOM	872	CG2	ILE	99	-36.422	2.226	2.584	1.00	22.88
ATOM	873	H	ILE	99	-33.040	2.561	0.444	1.00	0.00
ATOM	874	CD	ILE	99	-33.485	0.060	1.351	1.00	21.10
ATOM	875	N	GLY	100	-35.040	4.963	0.695	1.00	18.92
ATOM	876	CA	GLY	100	-35.588	6.309	0.657	1.00	17.35
ATOM	877	C	GLY	100	-35.422	7.060	1.960	1.00	16.46
ATOM	878	O	GLY	100	-34.850	6.529	2.911	1.00	17.40
ATOM	879	H	GLY	100	-34.118	4.851	1.002	1.00	0.00
ATOM	880	N	ALA	101	-35.909	8.297	1.993	1.00	14.63
ATOM	881	CA	ALA	101	-35.848	9.158	3.176	1.00	12.97
ATOM	882	C	ALA	101	-34.435	9.457	3.641	1.00	13.20
ATOM	883	O	ALA	101	-34.144	9.478	4.835	1.00	13.48
ATOM	884	CB	ALA	101	-36.664	8.569	4.311	1.00	12.66
ATOM	885	H	ALA	101	-36.349	8.638	1.183	1.00	0.00
ATOM	886	N	ASP	102	-33.568	9.745	2.682	1.00	14.67
ATOM	887	CA	ASP	102	-32.180	10.055	2.967	1.00	13.53
ATOM	888	C	ASP	102	-32.048	11.545	3.231	1.00	13.84
ATOM	889	O	ASP	102	-31.530	12.288	2.402	1.00	13.97
ATOM	890	CB	ASP	102	-31.312	9.661	1.775	1.00	12.12
ATOM	891	CG	ASP	102	-29.868	9.518	2.136	1.00	12.08
ATOM	892	OD1	ASP	102	-29.391	10.224	3.050	1.00	12.61
ATOM	893	OD2	ASP	102	-29.191	8.684	1.507	1.00	12.27
ATOM	894	H	ASP	102	-33.858	9.759	1.749	1.00	0.00
ATOM	895	N	ILE	103	-32.534	11.984	4.385	1.00	13.35
ATOM	896	CA	ILE	103	-32.452	13.390	4.749	1.00	12.32
ATOM	897	C	ILE	103	-32.223	13.469	6.257	1.00	12.42
ATOM	898	O	ILE	103	-32.628	12.564	6.996	1.00	11.46
ATOM	899	CB	ILE	103	-33.751	14.129	4.347	1.00	12.33
ATOM	900	CG1	ILE	103	-33.562	15.638	4.434	1.00	13.80
ATOM	901	CG2	ILE	103	-34.897	13.715	5.248	1.00	13.02
ATOM	902	H	ILE	103	-32.951	11.345	5.005	1.00	0.00
ATOM	903	CD	ILE	103	-34.742	16.432	3.908	1.00	14.33
ATOM	904	N	ALA	104	-31.518	14.506	6.705	1.00	12.64
ATOM	905	CA	ALA	104	-31.237	14.715	8.127	1.00	12.48
ATOM	906	C	ALA	104	-30.831	16.163	8.382	1.00	13.80
ATOM	907	O	ALA	104	-30.411	16.870	7.458	1.00	14.31
ATOM	908	CB	ALA	104	-30.155	13.775	8.606	1.00	13.23
ATOM	909	H	ALA	104	-31.138	15.162	6.089	1.00	0.00
ATOM	910	N	LEU	105	-30.974	16.598	9.633	1.00	14.87
ATOM	911	CA	LEU	105	-30.664	17.968	10.049	1.00	14.83
ATOM	912	C	LEU	105	-29.656	17.994	11.191	1.00	16.78
ATOM	913	O	LEU	105	-29.661	17.115	12.060	1.00	17.00
ATOM	914	CB	LEU	105	-31.936	18.666	10.532	1.00	13.18
ATOM	915	CG	LEU	105	-33.088	18.896	9.560	1.00	14.03
ATOM	916	CD1	LEU	105	-34.388	19.133	10.323	1.00	13.59
ATOM	917	CD2	LEU	105	-32.752	20.067	8.660	1.00	14.51
ATOM	918	H	LEU	105	-31.302	15.963	10.302	1.00	0.00
ATOM	919	N	LEU	106	-28.811	19.018	11.198	1.00	18.71
ATOM	920	CA	LEU	106	-27.812	19.188	12.244	1.00	20.93
ATOM	921	C	LEU	106	-27.994	20.582	12.836	1.00	24.16
ATOM	922	O	LEU	106	-27.995	21.581	12.109	1.00	23.68
ATOM	923	CB	LEU	106	-26.393	19.054	11.677	1.00	19.97
ATOM	924	CG	LEU	106	-26.056	17.849	10.790	1.00	19.78
ATOM	925	CD1	LEU	106	-24.596	17.905	10.365	1.00	19.11

ATOM	926	CD2	LEU	106	-26.347	16.554	11.522	1.00	20.05
ATOM	927	H	LEU	106	-28.858	19.649	10.453	1.00	0.00
ATOM	928	N	GLU	107	-28.209	20.644	14.143	1.00	27.22
ATOM	929	CA	GLU	107	-28.375	21.922	14.815	1.00	29.48
ATOM	930	C	GLU	107	-27.040	22.353	15.405	1.00	29.97
ATOM	931	O	GLU	107	-26.405	21.595	16.141	1.00	29.53
ATOM	932	CB	GLU	107	-29.422	21.817	15.918	1.00	32.17
ATOM	933	CG	GLU	107	-29.719	23.143	16.603	1.00	35.59
ATOM	934	CD	GLU	107	-30.837	23.033	17.614	1.00	37.20
ATOM	935	OE1	GLU	107	-31.764	23.871	17.580	1.00	37.65
ATOM	936	OE2	GLU	107	-30.805	22.092	18.436	1.00	39.60
ATOM	937	H	GLU	107	-28.246	19.812	14.647	1.00	0.00
ATOM	938	N	LEU	108	-26.599	23.551	15.041	1.00	30.82
ATOM	939	CA	LEU	108	-25.343	24.108	15.523	1.00	32.08
ATOM	940	C	LEU	108	-25.564	24.576	16.948	1.00	35.24
ATOM	941	O	LEU	108	-26.621	25.124	17.256	1.00	35.84
ATOM	942	CB	LEU	108	-24.928	25.295	14.654	1.00	28.82
ATOM	943	CG	LEU	108	-24.770	25.020	13.159	1.00	25.99
ATOM	944	CD1	LEU	108	-24.518	26.311	12.411	1.00	24.24
ATOM	945	CD2	LEU	108	-23.643	24.043	12.935	1.00	24.62
ATOM	946	H	LEU	108	-27.171	24.076	14.473	1.00	0.00
ATOM	947	N	GLU	109	-24.588	24.347	17.820	1.00	39.29
ATOM	948	CA	GLU	109	-24.718	24.761	19.211	1.00	43.61
ATOM	949	C	GLU	109	-25.036	26.254	19.251	1.00	46.30
ATOM	950	O	GLU	109	-25.997	26.677	19.897	1.00	47.02
ATOM	951	CB	GLU	109	-23.442	24.455	19.999	1.00	45.61
ATOM	952	CG	GLU	109	-23.635	24.533	21.512	1.00	50.99
ATOM	953	CD	GLU	109	-22.399	24.137	22.312	1.00	53.75
ATOM	954	OE1	GLU	109	-21.729	23.151	21.932	1.00	54.12
ATOM	955	OE2	GLU	109	-22.115	24.802	23.338	1.00	55.30
ATOM	956	H	GLU	109	-23.761	23.921	17.507	1.00	0.00
ATOM	957	N	GLU	110	-24.263	27.035	18.502	1.00	48.62
ATOM	958	CA	GLU	110	-24.463	28.479	18.421	1.00	50.88
ATOM	959	C	GLU	110	-24.815	28.826	16.983	1.00	50.50
ATOM	960	O	GLU	110	-24.411	28.125	16.057	1.00	51.02
ATOM	961	CB	GLU	110	-23.182	29.230	18.786	1.00	53.80
ATOM	962	CG	GLU	110	-22.666	29.004	20.186	1.00	57.89
ATOM	963	CD	GLU	110	-21.330	29.685	20.403	1.00	60.41
ATOM	964	OE1	GLU	110	-21.301	30.935	20.447	1.00	61.67
ATOM	965	OE2	GLU	110	-20.306	28.975	20.502	1.00	62.70
ATOM	966	H	GLU	110	-23.542	26.648	17.967	1.00	0.00
ATOM	967	N	PRO	111	-25.602	29.893	16.782	1.00	49.74
ATOM	968	CA	PRO	111	-26.006	30.332	15.443	1.00	49.65
ATOM	969	C	PRO	111	-24.803	30.832	14.652	1.00	49.30
ATOM	970	O	PRO	111	-23.702	30.950	15.191	1.00	49.59
ATOM	971	CB	PRO	111	-26.972	31.478	15.742	1.00	49.68
ATOM	972	CG	PRO	111	-27.569	31.075	17.055	1.00	50.22
ATOM	973	CD	PRO	111	-26.351	30.625	17.816	1.00	50.02
ATOM	974	N	VAL	112	-25.007	31.115	13.375	1.00	48.83
ATOM	975	CA	VAL	112	-23.924	31.617	12.550	1.00	50.43
ATOM	976	C	VAL	112	-24.176	33.078	12.227	1.00	53.43
ATOM	977	O	VAL	112	-25.308	33.558	12.334	1.00	53.99
ATOM	978	CB	VAL	112	-23.770	30.819	11.229	1.00	49.15
ATOM	979	CG1	VAL	112	-23.704	29.341	11.523	1.00	48.37
ATOM	980	CG2	VAL	112	-24.897	31.137	10.250	1.00	47.56
ATOM	981	H	VAL	112	-25.887	30.965	12.979	1.00	0.00
ATOM	982	N	LYS	113	-23.110	33.796	11.890	1.00	56.42
ATOM	983	CA	LYS	113	-23.214	35.201	11.516	1.00	58.82
ATOM	984	C	LYS	113	-23.289	35.238	9.994	1.00	59.61
ATOM	985	O	LYS	113	-22.279	35.059	9.307	1.00	60.14
ATOM	986	CB	LYS	113	-22.001	36.000	12.007	1.00	60.97
ATOM	987	CG	LYS	113	-22.056	36.404	13.477	1.00	63.60
ATOM	988	CD	LYS	113	-20.848	37.260	13.851	1.00	65.56

ATOM	989	CE	LYS	113	-20.963	37.833	15.263	1.00	66.59
ATOM	990	NZ	LYS	113	-19.797	38.700	15.618	1.00	66.87
ATOM	991	H	LYS	113	-22.228	33.376	11.854	1.00	0.00
ATOM	992	HZ1	LYS	113	-19.738	39.489	14.941	1.00	0.00
ATOM	993	HZ2	LYS	113	-18.929	38.131	15.567	1.00	0.00
ATOM	994	HZ3	LYS	113	-19.920	39.073	16.582	1.00	0.00
ATOM	995	N	VAL	114	-24.506	35.388	9.481	1.00	59.68
ATOM	996	CA	VAL	114	-24.743	35.433	8.044	1.00	59.43
ATOM	997	C	VAL	114	-24.134	36.658	7.384	1.00	58.88
ATOM	998	O	VAL	114	-24.019	37.722	7.996	1.00	58.87
ATOM	999	CB	VAL	114	-26.249	35.357	7.715	1.00	59.79
ATOM	1000	CG1	VAL	114	-26.795	33.994	8.108	1.00	60.14
ATOM	1001	CG2	VAL	114	-27.012	36.469	8.431	1.00	59.67
ATOM	1002	H	VAL	114	-25.254	35.472	10.102	1.00	0.00
ATOM	1003	N	SER	115	-23.769	36.505	6.119	1.00	58.84
ATOM	1004	CA	SER	115	-23.159	37.580	5.363	1.00	59.81
ATOM	1005	C	SER	115	-23.151	37.237	3.879	1.00	60.42
ATOM	1006	O	SER	115	-23.634	36.178	3.467	1.00	60.17
ATOM	1007	CB	SER	115	-21.725	37.808	5.856	1.00	60.17
ATOM	1008	OG	SER	115	-20.916	36.661	5.636	1.00	60.72
ATOM	1009	H	SER	115	-23.895	35.635	5.713	1.00	0.00
ATOM	1010	HG	SER	115	-20.360	36.810	4.886	1.00	0.00
ATOM	1011	N	SER	116	-22.572	38.127	3.084	1.00	61.27
ATOM	1012	CA	SER	116	-22.483	37.941	1.643	1.00	61.74
ATOM	1013	C	SER	116	-21.660	36.709	1.255	1.00	60.52
ATOM	1014	O	SER	116	-21.806	36.182	0.153	1.00	61.20
ATOM	1015	CB	SER	116	-21.904	39.205	0.994	1.00	63.18
ATOM	1016	OG	SER	116	-20.793	39.696	1.736	1.00	64.76
ATOM	1017	H	SER	116	-22.188	38.950	3.460	1.00	0.00
ATOM	1018	HG	SER	116	-20.630	40.602	1.428	1.00	0.00
ATOM	1019	N	HIS	117	-20.817	36.234	2.164	1.00	58.55
ATOM	1020	CA	HIS	117	-19.992	35.065	1.879	1.00	56.75
ATOM	1021	C	HIS	117	-20.518	33.801	2.526	1.00	52.95
ATOM	1022	O	HIS	117	-20.192	32.702	2.090	1.00	53.41
ATOM	1023	CB	HIS	117	-18.545	35.302	2.303	1.00	60.68
ATOM	1024	CG	HIS	117	-17.862	36.381	1.521	1.00	64.54
ATOM	1025	ND1	HIS	117	-17.221	36.142	0.325	1.00	65.45
ATOM	1026	CD2	HIS	117	-17.722	37.706	1.766	1.00	65.52
ATOM	1027	CE1	HIS	117	-16.715	37.273	-0.136	1.00	66.44
ATOM	1028	NE2	HIS	117	-17.006	38.236	0.720	1.00	66.78
ATOM	1029	H	HIS	117	-20.786	36.628	3.049	1.00	0.00
ATOM	1030	HD1	HIS	117	-17.135	35.257	-0.103	1.00	0.00
ATOM	1031	HE2	HIS	117	-16.760	39.187	0.638	1.00	0.00
ATOM	1032	N	VAL	118	-21.294	33.956	3.594	1.00	48.18
ATOM	1033	CA	VAL	118	-21.869	32.808	4.284	1.00	43.55
ATOM	1034	C	VAL	118	-23.293	33.097	4.725	1.00	41.05
ATOM	1035	O	VAL	118	-23.528	33.857	5.659	1.00	39.90
ATOM	1036	CB	VAL	118	-21.034	32.400	5.504	1.00	41.82
ATOM	1037	CG1	VAL	118	-21.786	31.391	6.342	1.00	41.84
ATOM	1038	CG2	VAL	118	-19.729	31.797	5.046	1.00	42.49
ATOM	1039	H	VAL	118	-21.478	34.827	3.996	1.00	0.00
ATOM	1040	N	HIS	119	-24.247	32.510	4.021	1.00	38.56
ATOM	1041	CA	HIS	119	-25.642	32.700	4.354	1.00	36.61
ATOM	1042	C	HIS	119	-26.429	31.512	3.856	1.00	35.13
ATOM	1043	O	HIS	119	-25.899	30.671	3.130	1.00	34.65
ATOM	1044	CB	HIS	119	-26.189	34.017	3.792	1.00	37.24
ATOM	1045	CG	HIS	119	-26.160	34.108	2.300	1.00	37.72
ATOM	1046	ND1	HIS	119	-25.251	34.891	1.621	1.00	38.43
ATOM	1047	CD2	HIS	119	-26.950	33.546	1.354	1.00	38.87
ATOM	1048	CE1	HIS	119	-25.482	34.811	0.323	1.00	38.41
ATOM	1049	NE2	HIS	119	-26.508	34.000	0.135	1.00	39.50
ATOM	1050	H	HIS	119	-24.025	31.859	3.317	1.00	0.00
ATOM	1051	HD1	HIS	119	-24.559	35.419	2.064	1.00	0.00

ATOM	1052	HE2	HIS	119	-26.901	33.744	-0.728	1.00	0.00
ATOM	1053	N	THR	120	-27.702	31.482	4.221	1.00	33.01
ATOM	1054	CA	THR	120	-28.590	30.396	3.874	1.00	31.34
ATOM	1055	C	THR	120	-29.019	30.289	2.414	1.00	30.45
ATOM	1056	O	THR	120	-28.808	31.200	1.610	1.00	28.82
ATOM	1057	CB	THR	120	-29.840	30.434	4.768	1.00	31.65
ATOM	1058	OG1	THR	120	-30.483	31.707	4.637	1.00	32.89
ATOM	1059	CG2	THR	120	-29.450	30.238	6.219	1.00	30.67
ATOM	1060	H	THR	120	-28.097	32.227	4.714	1.00	0.00
ATOM	1061	HG1	THR	120	-31.359	31.634	5.047	1.00	0.00
ATOM	1062	N	VAL	121	-29.592	29.130	2.095	1.00	31.55
ATOM	1063	CA	VAL	121	-30.108	28.795	0.770	1.00	31.99
ATOM	1064	C	VAL	121	-31.629	28.607	0.892	1.00	32.94
ATOM	1065	O	VAL	121	-32.110	27.915	1.793	1.00	33.66
ATOM	1066	CB	VAL	121	-29.463	27.493	0.240	1.00	30.43
ATOM	1067	CG1	VAL	121	-29.640	26.364	1.244	1.00	29.99
ATOM	1068	CG2	VAL	121	-30.057	27.116	-1.094	1.00	30.16
ATOM	1069	H	VAL	121	-29.631	28.456	2.802	1.00	0.00
ATOM	1070	N	THR	122	-32.379	29.228	-0.013	1.00	32.95
ATOM	1071	CA	THR	122	-33.834	29.147	0.016	1.00	32.19
ATOM	1072	C	THR	122	-34.326	27.738	-0.297	1.00	30.90
ATOM	1073	O	THR	122	-33.871	27.117	-1.259	1.00	31.56
ATOM	1074	CB	THR	122	-34.479	30.124	-1.012	1.00	33.41
ATOM	1075	OG1	THR	122	-33.878	31.423	-0.907	1.00	34.09
ATOM	1076	CG2	THR	122	-35.966	30.266	-0.745	1.00	34.09
ATOM	1077	H	THR	122	-31.960	29.715	-0.748	1.00	0.00
ATOM	1078	HG1	THR	122	-32.946	31.364	-1.114	1.00	0.00
ATOM	1079	N	LEU	123	-35.218	27.222	0.542	1.00	29.19
ATOM	1080	CA	LEU	123	-35.799	25.901	0.325	1.00	28.50
ATOM	1081	C	LEU	123	-36.855	26.112	-0.755	1.00	29.80
ATOM	1082	O	LEU	123	-37.422	27.197	-0.859	1.00	30.46
ATOM	1083	CB	LEU	123	-36.450	25.386	1.605	1.00	28.03
ATOM	1084	CG	LEU	123	-35.515	25.125	2.781	1.00	26.34
ATOM	1085	CD1	LEU	123	-36.319	24.727	4.006	1.00	25.05
ATOM	1086	CD2	LEU	123	-34.529	24.038	2.397	1.00	27.11
ATOM	1087	H	LEU	123	-35.506	27.754	1.306	1.00	0.00
ATOM	1088	N	PRO	124	-37.163	25.077	-1.549	1.00	31.12
ATOM	1089	CA	PRO	124	-38.161	25.230	-2.608	1.00	32.49
ATOM	1090	C	PRO	124	-39.580	25.127	-2.083	1.00	35.33
ATOM	1091	O	PRO	124	-39.821	24.512	-1.043	1.00	37.21
ATOM	1092	CB	PRO	124	-37.857	24.044	-3.509	1.00	30.44
ATOM	1093	CG	PRO	124	-37.594	22.973	-2.503	1.00	30.21
ATOM	1094	CD	PRO	124	-36.746	23.667	-1.432	1.00	30.84
ATOM	1095	N	PRO	125	-40.532	25.796	-2.750	1.00	36.65
ATOM	1096	CA	PRO	125	-41.934	25.735	-2.322	1.00	36.82
ATOM	1097	C	PRO	125	-42.461	24.329	-2.641	1.00	37.18
ATOM	1098	O	PRO	125	-42.138	23.762	-3.685	1.00	36.52
ATOM	1099	CB	PRO	125	-42.600	26.803	-3.187	1.00	36.99
ATOM	1100	CG	PRO	125	-41.724	26.858	-4.416	1.00	37.22
ATOM	1101	CD	PRO	125	-40.347	26.786	-3.824	1.00	36.60
ATOM	1102	N	ALA	126	-43.278	23.777	-1.752	1.00	38.36
ATOM	1103	CA	ALA	126	-43.813	22.424	-1.916	1.00	40.46
ATOM	1104	C	ALA	126	-44.421	22.065	-3.279	1.00	41.72
ATOM	1105	O	ALA	126	-44.518	20.883	-3.634	1.00	41.30
ATOM	1106	CB	ALA	126	-44.801	22.123	-0.803	1.00	40.84
ATOM	1107	H	ALA	126	-43.510	24.286	-0.952	1.00	0.00
ATOM	1108	N	SER	127	-44.835	23.073	-4.034	1.00	42.97
ATOM	1109	CA	SER	127	-45.436	22.848	-5.339	1.00	43.75
ATOM	1110	C	SER	127	-44.394	22.626	-6.436	1.00	44.29
ATOM	1111	O	SER	127	-44.645	21.889	-7.400	1.00	44.51
ATOM	1112	CB	SER	127	-46.326	24.034	-5.702	1.00	44.09
ATOM	1113	OG	SER	127	-45.623	25.254	-5.524	1.00	44.66
ATOM	1114	H	SER	127	-44.731	24.003	-3.759	1.00	0.00

ATOM	1115	HG	SER	127	-46.190	25.974	-5.822	1.00	0.00
ATOM	1116	N	GLU	128	-43.221	23.235	-6.266	1.00	43.79
ATOM	1117	CA	GLU	128	-42.145	23.137	-7.246	1.00	42.45
ATOM	1118	C	GLU	128	-41.730	21.699	-7.542	1.00	41.68
ATOM	1119	O	GLU	128	-41.532	20.884	-6.629	1.00	41.78
ATOM	1120	CB	GLU	128	-40.943	23.966	-6.809	1.00	42.43
ATOM	1121	CG	GLU	128	-39.861	24.068	-7.864	1.00	43.95
ATOM	1122	CD	GLU	128	-40.376	24.577	-9.192	1.00	44.45
ATOM	1123	OE1	GLU	128	-40.728	25.772	-9.271	1.00	45.29
ATOM	1124	OE2	GLU	128	-40.427	23.774	-10.152	1.00	44.56
ATOM	1125	H	GLU	128	-43.034	23.724	-5.442	1.00	0.00
ATOM	1126	N	THR	129	-41.567	21.413	-8.830	1.00	40.75
ATOM	1127	CA	THR	129	-41.222	20.078	-9.299	1.00	40.10
ATOM	1128	C	THR	129	-39.835	19.903	-9.922	1.00	38.65
ATOM	1129	O	THR	129	-39.264	18.808	-9.860	1.00	40.00
ATOM	1130	CB	THR	129	-42.288	19.602	-10.295	1.00	41.05
ATOM	1131	OG1	THR	129	-43.575	19.685	-9.669	1.00	43.53
ATOM	1132	CG2	THR	129	-42.035	18.158	-10.722	1.00	41.84
ATOM	1133	H	THR	129	-41.661	22.158	-9.468	1.00	0.00
ATOM	1134	HG1	THR	129	-43.764	20.555	-9.295	1.00	0.00
ATOM	1135	N	PHE	130	-39.284	20.974	-10.488	1.00	35.55
ATOM	1136	CA	PHE	130	-37.970	20.928	-11.135	1.00	31.51
ATOM	1137	C	PHE	130	-37.977	19.914	-12.276	1.00	29.64
ATOM	1138	O	PHE	130	-37.498	18.787	-12.124	1.00	28.89
ATOM	1139	CB	PHE	130	-36.866	20.585	-10.125	1.00	28.53
ATOM	1140	CG	PHE	130	-36.804	21.523	-8.958	1.00	25.36
ATOM	1141	CD1	PHE	130	-37.300	21.141	-7.719	1.00	23.73
ATOM	1142	CD2	PHE	130	-36.266	22.796	-9.102	1.00	24.25
ATOM	1143	CE1	PHE	130	-37.264	22.013	-6.635	1.00	23.16
ATOM	1144	CE2	PHE	130	-36.228	23.673	-8.024	1.00	23.34
ATOM	1145	CZ	PHE	130	-36.727	23.280	-6.788	1.00	22.01
ATOM	1146	H	PHE	130	-39.751	21.841	-10.451	1.00	0.00
ATOM	1147	N	PRO	131	-38.619	20.271	-13.399	1.00	28.64
ATOM	1148	CA	PRO	131	-38.700	19.400	-14.568	1.00	28.29
ATOM	1149	C	PRO	131	-37.468	19.602	-15.432	1.00	28.45
ATOM	1150	O	PRO	131	-36.752	20.598	-15.283	1.00	28.57
ATOM	1151	CB	PRO	131	-39.958	19.901	-15.266	1.00	28.54
ATOM	1152	CG	PRO	131	-39.879	21.363	-15.042	1.00	28.58
ATOM	1153	CD	PRO	131	-39.447	21.477	-13.591	1.00	28.98
ATOM	1154	N	PRO	132	-37.207	18.668	-16.356	1.00	29.47
ATOM	1155	CA	PRO	132	-36.042	18.777	-17.237	1.00	30.72
ATOM	1156	C	PRO	132	-36.038	20.159	-17.876	1.00	33.13
ATOM	1157	O	PRO	132	-37.105	20.695	-18.202	1.00	34.68
ATOM	1158	CB	PRO	132	-36.311	17.696	-18.281	1.00	30.49
ATOM	1159	CG	PRO	132	-37.101	16.677	-17.519	1.00	29.11
ATOM	1160	CD	PRO	132	-38.053	17.526	-16.740	1.00	28.78
ATOM	1161	N	GLY	133	-34.855	20.749	-18.017	1.00	33.87
ATOM	1162	CA	GLY	133	-34.758	22.069	-18.614	1.00	33.20
ATOM	1163	C	GLY	133	-34.338	23.109	-17.596	1.00	32.95
ATOM	1164	O	GLY	133	-33.735	24.128	-17.942	1.00	33.91
ATOM	1165	H	GLY	133	-34.040	20.311	-17.702	1.00	0.00
ATOM	1166	N	MET	134	-34.658	22.858	-16.335	1.00	32.05
ATOM	1167	CA	MET	134	-34.303	23.777	-15.267	1.00	31.83
ATOM	1168	C	MET	134	-32.778	23.817	-15.105	1.00	30.46
ATOM	1169	O	MET	134	-32.121	22.777	-15.113	1.00	31.41
ATOM	1170	CB	MET	134	-34.952	23.307	-13.969	1.00	34.34
ATOM	1171	CG	MET	134	-35.412	24.426	-13.081	1.00	37.85
ATOM	1172	SD	MET	134	-36.862	25.212	-13.761	1.00	42.47
ATOM	1173	CE	MET	134	-38.087	24.722	-12.527	1.00	41.90
ATOM	1174	H	MET	134	-35.170	22.059	-16.090	1.00	0.00
ATOM	1175	N	PRO	135	-32.185	25.014	-15.028	1.00	28.25
ATOM	1176	CA	PRO	135	-30.727	25.070	-14.870	1.00	27.90
ATOM	1177	C	PRO	135	-30.339	24.724	-13.433	1.00	28.22

ATOM	1178	O	PRO	135	-30.611	25.504	-12.516	1.00	30.06
ATOM	1179	CB	PRO	135	-30.412	26.528	-15.197	1.00	26.41
ATOM	1180	CG	PRO	135	-31.630	27.247	-14.686	1.00	26.36
ATOM	1181	CD	PRO	135	-32.758	26.365	-15.157	1.00	27.74
ATOM	1182	N	CYS	136	-29.722	23.564	-13.225	1.00	26.87
ATOM	1183	CA	CYS	136	-29.337	23.175	-11.867	1.00	25.46
ATOM	1184	C	CYS	136	-27.848	22.896	-11.702	1.00	24.30
ATOM	1185	O	CYS	136	-27.158	22.568	-12.667	1.00	23.91
ATOM	1186	CB	CYS	136	-30.160	21.970	-11.398	1.00	24.62
ATOM	1187	SG	CYS	136	-31.969	22.212	-11.392	1.00	22.42
ATOM	1188	H	CYS	136	-29.560	22.910	-13.932	1.00	0.00
ATOM	1189	N	TRP	137	-27.367	23.020	-10.465	1.00	24.11
ATOM	1190	CA	TRP	137	-25.959	22.805	-10.135	1.00	24.88
ATOM	1191	C	TRP	137	-25.732	21.925	-8.902	1.00	24.36
ATOM	1192	O	TRP	137	-26.593	21.819	-8.021	1.00	25.47
ATOM	1193	CB	TRP	137	-25.268	24.147	-9.892	1.00	26.67
ATOM	1194	CG	TRP	137	-25.157	25.014	-11.098	1.00	28.41
ATOM	1195	CD1	TRP	137	-26.153	25.744	-11.687	1.00	28.77
ATOM	1196	CD2	TRP	137	-23.983	25.241	-11.871	1.00	27.98
ATOM	1197	NE1	TRP	137	-25.664	26.409	-12.784	1.00	28.69
ATOM	1198	CE2	TRP	137	-24.333	26.114	-12.921	1.00	28.37
ATOM	1199	CE3	TRP	137	-22.664	24.791	-11.781	1.00	29.44
ATOM	1200	CZ2	TRP	137	-23.414	26.543	-13.872	1.00	30.36
ATOM	1201	CZ3	TRP	137	-21.747	25.218	-12.726	1.00	31.02
ATOM	1202	CH2	TRP	137	-22.125	26.083	-13.759	1.00	31.41
ATOM	1203	H	TRP	137	-27.990	23.232	-9.747	1.00	0.00
ATOM	1204	HE1	TRP	137	-26.175	27.059	-13.299	1.00	0.00
ATOM	1205	N	VAL	138	-24.570	21.284	-8.857	1.00	22.15
ATOM	1206	CA	VAL	138	-24.190	20.442	-7.734	1.00	21.72
ATOM	1207	C	VAL	138	-22.841	20.969	-7.286	1.00	22.73
ATOM	1208	O	VAL	138	-21.997	21.302	-8.123	1.00	24.43
ATOM	1209	CB	VAL	138	-23.976	18.984	-8.135	1.00	20.93
ATOM	1210	CG1	VAL	138	-23.820	18.135	-6.890	1.00	21.73
ATOM	1211	CG2	VAL	138	-25.117	18.496	-8.964	1.00	21.44
ATOM	1212	H	VAL	138	-23.970	21.370	-9.627	1.00	0.00
ATOM	1213	N	THR	139	-22.624	21.021	-5.979	1.00	20.79
ATOM	1214	CA	THR	139	-21.370	21.520	-5.443	1.00	18.68
ATOM	1215	C	THR	139	-20.831	20.619	-4.343	1.00	19.87
ATOM	1216	O	THR	139	-21.602	20.052	-3.562	1.00	20.93
ATOM	1217	CB	THR	139	-21.555	22.929	-4.889	1.00	16.45
ATOM	1218	OG1	THR	139	-22.812	23.005	-4.211	1.00	16.50
ATOM	1219	CG2	THR	139	-21.548	23.930	-6.005	1.00	14.04
ATOM	1220	H	THR	139	-23.333	20.742	-5.369	1.00	0.00
ATOM	1221	HG1	THR	139	-23.024	22.161	-3.784	1.00	0.00
ATOM	1222	N	GLY	140	-19.510	20.503	-4.274	1.00	19.46
ATOM	1223	CA	GLY	140	-18.907	19.664	-3.256	1.00	18.62
ATOM	1224	C	GLY	140	-17.411	19.506	-3.399	1.00	17.41
ATOM	1225	O	GLY	140	-16.805	20.038	-4.330	1.00	17.38
ATOM	1226	H	GLY	140	-18.948	20.961	-4.940	1.00	0.00
ATOM	1227	N	TRP	141	-16.822	18.781	-2.453	1.00	17.33
ATOM	1228	CA	TRP	141	-15.385	18.519	-2.423	1.00	17.65
ATOM	1229	C	TRP	141	-15.154	17.022	-2.583	1.00	17.27
ATOM	1230	O	TRP	141	-14.281	16.454	-1.918	1.00	17.41
ATOM	1231	CB	TRP	141	-14.794	18.933	-1.073	1.00	18.30
ATOM	1232	CG	TRP	141	-14.732	20.396	-0.805	1.00	18.20
ATOM	1233	CD1	TRP	141	-13.745	21.255	-1.184	1.00	18.41
ATOM	1234	CD2	TRP	141	-15.653	21.161	-0.027	1.00	17.70
ATOM	1235	NE1	TRP	141	-13.989	22.504	-0.683	1.00	18.56
ATOM	1236	CE2	TRP	141	-15.156	22.477	0.032	1.00	18.28
ATOM	1237	CE3	TRP	141	-16.851	20.859	0.633	1.00	18.76
ATOM	1238	CZ2	TRP	141	-15.813	23.495	0.724	1.00	19.77
ATOM	1239	CZ3	TRP	141	-17.506	21.872	1.323	1.00	19.19
ATOM	1240	CH2	TRP	141	-16.986	23.173	1.362	1.00	20.82

ATOM	1241	H	TRP	141	-17.406	18.366	-1.792	1.00	0.00
ATOM	1242	HE1	TRP	141	-13.414	23.289	-0.817	1.00	0.00
ATOM	1243	N	GLY	142	-15.965	16.377	-3.413	1.00	16.46
ATOM	1244	CA	GLY	142	-15.834	14.947	-3.602	1.00	16.92
ATOM	1245	C	GLY	142	-14.931	14.507	-4.735	1.00	17.67
ATOM	1246	O	GLY	142	-14.312	15.329	-5.412	1.00	18.99
ATOM	1247	H	GLY	142	-16.690	16.821	-3.903	1.00	0.00
ATOM	1248	N	ASP	143	-14.857	13.195	-4.928	1.00	16.94
ATOM	1249	CA	ASP	143	-14.047	12.598	-5.970	1.00	17.99
ATOM	1250	C	ASP	143	-14.314	13.256	-7.307	1.00	20.06
ATOM	1251	O	ASP	143	-15.459	13.409	-7.722	1.00	20.61
ATOM	1252	CB	ASP	143	-14.328	11.100	-6.062	1.00	17.04
ATOM	1253	CG	ASP	143	-13.772	10.331	-4.886	1.00	15.16
ATOM	1254	OD1	ASP	143	-13.263	10.965	-3.937	1.00	14.81
ATOM	1255	OD2	ASP	143	-13.833	9.084	-4.917	1.00	13.79
ATOM	1256	H	ASP	143	-15.356	12.605	-4.335	1.00	0.00
ATOM	1257	N	VAL	144	-13.246	13.640	-7.986	1.00	23.01
ATOM	1258	CA	VAL	144	-13.374	14.293	-9.278	1.00	26.09
ATOM	1259	C	VAL	144	-13.688	13.281	-10.366	1.00	28.14
ATOM	1260	O	VAL	144	-13.979	13.652	-11.506	1.00	29.65
ATOM	1261	CB	VAL	144	-12.106	15.080	-9.642	1.00	26.19
ATOM	1262	CG1	VAL	144	-11.901	16.200	-8.641	1.00	25.96
ATOM	1263	CG2	VAL	144	-10.892	14.155	-9.671	1.00	26.43
ATOM	1264	H	VAL	144	-12.389	13.374	-7.594	1.00	0.00
ATOM	1265	N	ASP	145	-13.623	12.005	-10.003	1.00	29.52
ATOM	1266	CA	ASP	145	-13.917	10.920	-10.922	1.00	31.28
ATOM	1267	C	ASP	145	-14.024	9.638	-10.113	1.00	31.83
ATOM	1268	O	ASP	145	-13.555	9.565	-8.977	1.00	30.05
ATOM	1269	CB	ASP	145	-12.818	10.779	-11.975	1.00	33.12
ATOM	1270	CG	ASP	145	-13.321	10.159	-13.272	1.00	34.76
ATOM	1271	OD1	ASP	145	-13.019	10.718	-14.350	1.00	35.56
ATOM	1272	OD2	ASP	145	-14.016	9.121	-13.224	1.00	34.67
ATOM	1273	H	ASP	145	-13.376	11.754	-9.086	1.00	0.00
ATOM	1274	N	ASN	146	-14.688	8.652	-10.696	1.00	34.26
ATOM	1275	CA	ASN	146	-14.895	7.351	-10.087	1.00	36.45
ATOM	1276	C	ASN	146	-13.584	6.916	-9.453	1.00	37.80
ATOM	1277	O	ASN	146	-12.611	6.649	-10.156	1.00	37.96
ATOM	1278	CB	ASN	146	-15.302	6.364	-11.178	1.00	37.99
ATOM	1279	CG	ASN	146	-16.382	5.423	-10.731	1.00	39.85
ATOM	1280	OD1	ASN	146	-17.567	5.654	-10.981	1.00	40.60
ATOM	1281	ND2	ASN	146	-15.989	4.350	-10.061	1.00	42.11
ATOM	1282	H	ASN	146	-15.009	8.813	-11.605	1.00	0.00
ATOM	1283	HD21	ASN	146	-15.025	4.217	-9.898	1.00	0.00
ATOM	1284	HD22	ASN	146	-16.668	3.730	-9.734	1.00	0.00
ATOM	1285	N	ASP	147	-13.550	6.903	-8.125	1.00	40.45
ATOM	1286	CA	ASP	147	-12.353	6.529	-7.375	1.00	43.92
ATOM	1287	C	ASP	147	-11.154	7.393	-7.758	1.00	44.87
ATOM	1288	O	ASP	147	-10.160	6.909	-8.302	1.00	45.36
ATOM	1289	CB	ASP	147	-12.026	5.039	-7.534	1.00	46.32
ATOM	1290	CG	ASP	147	-12.826	4.156	-6.584	1.00	49.75
ATOM	1291	OD1	ASP	147	-13.227	4.637	-5.495	1.00	50.63
ATOM	1292	OD2	ASP	147	-13.058	2.973	-6.933	1.00	50.18
ATOM	1293	H	ASP	147	-14.314	7.201	-7.591	1.00	0.00
ATOM	1294	N	GLU	149	-11.273	8.684	-7.471	1.00	44.87
ATOM	1295	CA	GLU	149	-10.231	9.656	-7.749	1.00	44.17
ATOM	1296	C	GLU	149	-10.398	10.804	-6.764	1.00	41.75
ATOM	1297	O	GLU	149	-11.291	11.640	-6.911	1.00	41.69
ATOM	1298	CB	GLU	149	-10.337	10.161	-9.190	1.00	48.13
ATOM	1299	CG	GLU	149	-9.525	9.366	-10.203	1.00	54.18
ATOM	1300	CD	GLU	149	-8.027	9.634	-10.100	1.00	58.78
ATOM	1301	OE1	GLU	149	-7.289	8.776	-9.557	1.00	60.56
ATOM	1302	OE2	GLU	149	-7.587	10.712	-10.566	1.00	61.37
ATOM	1303	H	GLU	149	-12.107	8.995	-7.047	1.00	0.00

ATOM	1304	N	ARG	150	-9.537	10.832	-5.756	1.00	39.44
ATOM	1305	CA	ARG	150	-9.584	11.863	-4.728	1.00	38.81
ATOM	1306	C	ARG	150	-9.419	13.271	-5.288	1.00	35.43
ATOM	1307	O	ARG	150	-8.768	13.469	-6.309	1.00	34.38
ATOM	1308	CB	ARG	150	-8.488	11.614	-3.683	1.00	42.97
ATOM	1309	CG	ARG	150	-7.062	11.882	-4.183	1.00	48.22
ATOM	1310	CD	ARG	150	-6.002	11.501	-3.145	1.00	51.86
ATOM	1311	NE	ARG	150	-5.315	12.662	-2.581	1.00	54.43
ATOM	1312	CZ	ARG	150	-3.990	12.820	-2.563	1.00	56.69
ATOM	1313	NH1	ARG	150	-3.184	11.894	-3.077	1.00	56.01
ATOM	1314	NH2	ARG	150	-3.461	13.913	-2.025	1.00	58.24
ATOM	1315	H	ARG	150	-8.851	10.139	-5.749	1.00	0.00
ATOM	1316	HE	ARG	150	-5.913	13.347	-2.204	1.00	0.00
ATOM	1317	HH11	ARG	150	-3.528	11.050	-3.487	1.00	0.00
ATOM	1318	HH12	ARG	150	-2.195	12.061	-3.059	1.00	0.00
ATOM	1319	HH21	ARG	150	-4.015	14.635	-1.614	1.00	0.00
ATOM	1320	HH22	ARG	150	-2.459	14.000	-2.054	1.00	0.00
ATOM	1321	N	LEU	151	-10.043	14.240	-4.634	1.00	33.17
ATOM	1322	CA	LEU	151	-9.918	15.632	-5.045	1.00	32.33
ATOM	1323	C	LEU	151	-8.483	16.015	-4.669	1.00	32.56
ATOM	1324	O	LEU	151	-8.120	15.992	-3.489	1.00	34.95
ATOM	1325	CB	LEU	151	-10.927	16.496	-4.276	1.00	31.19
ATOM	1326	CG	LEU	151	-10.906	18.023	-4.425	1.00	29.95
ATOM	1327	CD1	LEU	151	-11.280	18.446	-5.840	1.00	28.73
ATOM	1328	CD2	LEU	151	-11.869	18.632	-3.420	1.00	29.52
ATOM	1329	H	LEU	151	-10.610	14.016	-3.869	1.00	0.00
ATOM	1330	N	PRO	152	-7.633	16.326	-5.666	1.00	30.14
ATOM	1331	CA	PRO	152	-6.240	16.696	-5.401	1.00	27.60
ATOM	1332	C	PRO	152	-6.087	17.992	-4.601	1.00	25.89
ATOM	1333	O	PRO	152	-6.860	18.947	-4.777	1.00	25.84
ATOM	1334	CB	PRO	152	-5.670	16.874	-6.809	1.00	26.42
ATOM	1335	CG	PRO	152	-6.542	16.036	-7.657	1.00	26.55
ATOM	1336	CD	PRO	152	-7.893	16.358	-7.112	1.00	28.51
ATOM	1337	N	PRO	152A	-5.127	18.021	-3.659	1.00	23.33
ATOM	1338	CA	PRO	152A	-4.934	19.244	-2.881	1.00	21.00
ATOM	1339	C	PRO	152A	-4.515	20.332	-3.867	1.00	20.45
ATOM	1340	O	PRO	152A	-3.860	20.040	-4.868	1.00	19.44
ATOM	1341	CB	PRO	152A	-3.804	18.863	-1.923	1.00	19.97
ATOM	1342	CG	PRO	152A	-3.098	17.747	-2.616	1.00	20.16
ATOM	1343	CD	PRO	152A	-4.215	16.959	-3.203	1.00	22.00
ATOM	1344	N	PRO	152B	-4.935	21.588	-3.638	1.00	21.24
ATOM	1345	CA	PRO	152B	-5.386	22.202	-2.386	1.00	20.91
ATOM	1346	C	PRO	152B	-6.885	22.091	-2.118	1.00	20.62
ATOM	1347	O	PRO	152B	-7.484	23.014	-1.569	1.00	22.33
ATOM	1348	CB	PRO	152B	-4.982	23.656	-2.577	1.00	21.15
ATOM	1349	CG	PRO	152B	-5.313	23.873	-4.012	1.00	21.38
ATOM	1350	CD	PRO	152B	-4.761	22.620	-4.681	1.00	21.72
ATOM	1351	N	PHE	153	-7.504	21.017	-2.591	1.00	19.80
ATOM	1352	CA	PHE	153	-8.929	20.763	-2.366	1.00	18.06
ATOM	1353	C	PHE	153	-9.862	21.931	-2.676	1.00	18.64
ATOM	1354	O	PHE	153	-10.518	22.481	-1.781	1.00	18.67
ATOM	1355	CB	PHE	153	-9.151	20.271	-0.935	1.00	13.82
ATOM	1356	CG	PHE	153	-8.138	19.263	-0.492	1.00	10.65
ATOM	1357	CD1	PHE	153	-7.329	19.511	0.613	1.00	9.56
ATOM	1358	CD2	PHE	153	-7.950	18.093	-1.214	1.00	8.00
ATOM	1359	CE1	PHE	153	-6.347	18.615	0.984	1.00	8.00
ATOM	1360	CE2	PHE	153	-6.974	17.198	-0.848	1.00	8.00
ATOM	1361	CZ	PHE	153	-6.169	17.457	0.251	1.00	8.00
ATOM	1362	H	PHE	153	-7.061	20.371	-3.172	1.00	0.00
ATOM	1363	N	PRO	154	-9.868	22.375	-3.941	1.00	18.99
ATOM	1364	CA	PRO	154	-10.730	23.482	-4.357	1.00	19.22
ATOM	1365	C	PRO	154	-12.177	23.004	-4.372	1.00	20.58
ATOM	1366	O	PRO	154	-12.429	21.815	-4.578	1.00	22.09

ATOM	1367	CB	PRO	154	-10.245	23.759	-5.774	1.00	18.84
ATOM	1368	CG	PRO	154	-9.812	22.409	-6.253	1.00	18.04
ATOM	1369	CD	PRO	154	-9.041	21.904	-5.068	1.00	17.93
ATOM	1370	N	LEU	155	-13.124	23.904	-4.123	1.00	20.02
ATOM	1371	CA	LEU	155	-14.531	23.521	-4.153	1.00	18.98
ATOM	1372	C	LEU	155	-14.952	23.507	-5.617	1.00	19.90
ATOM	1373	O	LEU	155	-14.746	24.491	-6.335	1.00	20.15
ATOM	1374	CB	LEU	155	-15.394	24.512	-3.382	1.00	17.09
ATOM	1375	CG	LEU	155	-16.892	24.277	-3.545	1.00	15.73
ATOM	1376	CD1	LEU	155	-17.267	23.006	-2.838	1.00	18.10
ATOM	1377	CD2	LEU	155	-17.673	25.437	-2.980	1.00	15.76
ATOM	1378	H	LEU	155	-12.909	24.851	-3.954	1.00	0.00
ATOM	1379	N	LYS	156	-15.521	22.393	-6.062	1.00	19.19
ATOM	1380	CA	LYS	156	-15.956	22.265	-7.439	1.00	17.77
ATOM	1381	C	LYS	156	-17.478	22.340	-7.546	1.00	17.11
ATOM	1382	O	LYS	156	-18.196	22.030	-6.591	1.00	17.35
ATOM	1383	CB	LYS	156	-15.437	20.959	-8.046	1.00	18.12
ATOM	1384	CG	LYS	156	-13.916	20.881	-8.223	1.00	17.75
ATOM	1385	CD	LYS	156	-13.487	19.540	-8.845	1.00	18.50
ATOM	1386	CE	LYS	156	-13.955	19.380	-10.306	1.00	20.12
ATOM	1387	NZ	LYS	156	-13.777	17.997	-10.879	1.00	20.18
ATOM	1388	H	LYS	156	-15.710	21.637	-5.466	1.00	0.00
ATOM	1389	HZ1	LYS	156	-14.430	17.357	-10.351	1.00	0.00
ATOM	1390	HZ2	LYS	156	-12.810	17.663	-10.711	1.00	0.00
ATOM	1391	HZ3	LYS	156	-14.013	17.920	-11.880	1.00	0.00
ATOM	1392	N	GLN	157	-17.942	22.829	-8.693	1.00	15.66
ATOM	1393	CA	GLN	157	-19.358	22.974	-9.013	1.00	13.71
ATOM	1394	C	GLN	157	-19.509	22.298	-10.361	1.00	13.57
ATOM	1395	O	GLN	157	-18.511	22.068	-11.039	1.00	13.93
ATOM	1396	CB	GLN	157	-19.717	24.448	-9.193	1.00	13.33
ATOM	1397	CG	GLN	157	-19.008	25.099	-10.365	1.00	14.13
ATOM	1398	CD	GLN	157	-19.338	26.568	-10.525	1.00	15.78
ATOM	1399	OE1	GLN	157	-19.604	27.268	-9.550	1.00	16.19
ATOM	1400	NE2	GLN	157	-19.295	27.052	-11.760	1.00	16.77
ATOM	1401	H	GLN	157	-17.300	23.134	-9.359	1.00	0.00
ATOM	1402	HE21	GLN	157	-19.018	26.439	-12.486	1.00	0.00
ATOM	1403	HE22	GLN	157	-19.515	27.979	-11.932	1.00	0.00
ATOM	1404	N	VAL	158	-20.741	21.997	-10.755	1.00	14.27
ATOM	1405	CA	VAL	158	-21.011	21.356	-12.041	1.00	15.15
ATOM	1406	C	VAL	158	-22.488	21.486	-12.365	1.00	17.08
ATOM	1407	O	VAL	158	-23.325	21.388	-11.473	1.00	20.23
ATOM	1408	CB	VAL	158	-20.620	19.859	-12.034	1.00	14.74
ATOM	1409	CG1	VAL	158	-21.555	19.054	-11.142	1.00	16.38
ATOM	1410	CG2	VAL	158	-20.618	19.312	-13.439	1.00	15.18
ATOM	1411	H	VAL	158	-21.483	22.139	-10.127	1.00	0.00
ATOM	1412	N	LYS	159	-22.806	21.758	-13.624	1.00	18.36
ATOM	1413	CA	LYS	159	-24.195	21.908	-14.053	1.00	19.23
ATOM	1414	C	LYS	159	-24.746	20.552	-14.512	1.00	18.92
ATOM	1415	O	LYS	159	-24.273	19.967	-15.490	1.00	18.64
ATOM	1416	CB	LYS	159	-24.269	22.927	-15.189	1.00	20.90
ATOM	1417	CG	LYS	159	-25.671	23.312	-15.630	1.00	22.93
ATOM	1418	CD	LYS	159	-25.628	23.843	-17.054	1.00	24.18
ATOM	1419	CE	LYS	159	-26.881	24.579	-17.421	1.00	25.27
ATOM	1420	NZ	LYS	159	-27.011	25.792	-16.570	1.00	28.52
ATOM	1421	H	LYS	159	-22.093	21.839	-14.285	1.00	0.00
ATOM	1422	HZ1	LYS	159	-26.160	26.371	-16.715	1.00	0.00
ATOM	1423	HZ2	LYS	159	-27.095	25.522	-15.568	1.00	0.00
ATOM	1424	HZ3	LYS	159	-27.840	26.323	-16.909	1.00	0.00
ATOM	1425	N	VAL	160	-25.769	20.070	-13.827	1.00	18.97
ATOM	1426	CA	VAL	160	-26.351	18.782	-14.163	1.00	19.55
ATOM	1427	C	VAL	160	-27.766	18.883	-14.716	1.00	20.23
ATOM	1428	O	VAL	160	-28.546	19.739	-14.300	1.00	21.70
ATOM	1429	CB	VAL	160	-26.384	17.864	-12.926	1.00	19.41

ATOM	1430	CG1	VAL	160	-24.972	17.540	-12.481	1.00	19.83
ATOM	1431	CG2	VAL	160	-27.164	18.534	-11.794	1.00	19.22
ATOM	1432	H	VAL	160	-26.171	20.632	-13.130	1.00	0.00
ATOM	1433	N	PRO	161	-28.081	18.077	-15.741	1.00	19.90
ATOM	1434	CA	PRO	161	-29.436	18.145	-16.283	1.00	19.73
ATOM	1435	C	PRO	161	-30.372	17.284	-15.432	1.00	19.71
ATOM	1436	O	PRO	161	-30.018	16.172	-15.037	1.00	18.49
ATOM	1437	CB	PRO	161	-29.259	17.583	-17.691	1.00	18.89
ATOM	1438	CG	PRO	161	-28.171	16.589	-17.521	1.00	19.76
ATOM	1439	CD	PRO	161	-27.190	17.338	-16.648	1.00	21.05
ATOM	1440	N	ILE	162	-31.525	17.849	-15.089	1.00	20.70
ATOM	1441	CA	ILE	162	-32.548	17.180	-14.293	1.00	20.87
ATOM	1442	C	ILE	162	-33.297	16.202	-15.190	1.00	22.73
ATOM	1443	O	ILE	162	-33.305	16.364	-16.413	1.00	23.43
ATOM	1444	CB	ILE	162	-33.575	18.208	-13.779	1.00	18.92
ATOM	1445	CG1	ILE	162	-32.881	19.307	-12.982	1.00	18.56
ATOM	1446	CG2	ILE	162	-34.612	17.538	-12.927	1.00	19.42
ATOM	1447	H	ILE	162	-31.709	18.761	-15.372	1.00	0.00
ATOM	1448	CD	ILE	162	-32.289	18.836	-11.694	1.00	20.32
ATOM	1449	N	MET	163	-33.891	15.169	-14.608	1.00	24.74
ATOM	1450	CA	MET	163	-34.671	14.239	-15.407	1.00	28.15
ATOM	1451	C	MET	163	-35.870	13.631	-14.685	1.00	28.93
ATOM	1452	O	MET	163	-35.850	13.423	-13.474	1.00	30.57
ATOM	1453	CB	MET	163	-33.794	13.166	-16.045	1.00	30.47
ATOM	1454	CG	MET	163	-33.211	12.144	-15.114	1.00	34.74
ATOM	1455	SD	MET	163	-32.320	10.949	-16.108	1.00	37.70
ATOM	1456	CE	MET	163	-31.014	12.027	-16.815	1.00	37.47
ATOM	1457	H	MET	163	-33.781	15.028	-13.647	1.00	0.00
ATOM	1458	N	GLU	164	-36.945	13.433	-15.436	1.00	29.40
ATOM	1459	CA	GLU	164	-38.174	12.867	-14.916	1.00	31.77
ATOM	1460	C	GLU	164	-37.888	11.586	-14.174	1.00	31.92
ATOM	1461	O	GLU	164	-37.086	10.779	-14.630	1.00	33.29
ATOM	1462	CB	GLU	164	-39.119	12.558	-16.071	1.00	35.74
ATOM	1463	CG	GLU	164	-40.002	13.708	-16.490	1.00	41.14
ATOM	1464	CD	GLU	164	-41.448	13.479	-16.112	1.00	45.91
ATOM	1465	OE1	GLU	164	-42.319	14.218	-16.620	1.00	47.97
ATOM	1466	OE2	GLU	164	-41.723	12.545	-15.316	1.00	49.13
ATOM	1467	H	GLU	164	-36.916	13.682	-16.380	1.00	0.00
ATOM	1468	N	ASN	165	-38.564	11.384	-13.049	1.00	31.65
ATOM	1469	CA	ASN	165	-38.392	10.171	-12.254	1.00	30.80
ATOM	1470	C	ASN	165	-38.757	8.927	-13.054	1.00	31.68
ATOM	1471	O	ASN	165	-38.050	7.929	-13.002	1.00	31.61
ATOM	1472	CB	ASN	165	-39.263	10.205	-10.998	1.00	30.02
ATOM	1473	CG	ASN	165	-38.612	10.934	-9.857	1.00	29.18
ATOM	1474	OD1	ASN	165	-38.243	12.105	-9.976	1.00	31.19
ATOM	1475	ND2	ASN	165	-38.479	10.256	-8.731	1.00	28.13
ATOM	1476	H	ASN	165	-39.169	12.091	-12.754	1.00	0.00
ATOM	1477	HD21ASN		165	-38.797	9.326	-8.662	1.00	0.00
ATOM	1478	HD22ASN		165	-38.061	10.716	-7.977	1.00	0.00
ATOM	1479	N	HIS	166	-39.842	8.997	-13.823	1.00	32.91
ATOM	1480	CA	HIS	166	-40.296	7.850	-14.612	1.00	34.53
ATOM	1481	C	HIS	166	-39.276	7.405	-15.648	1.00	32.37
ATOM	1482	O	HIS	166	-39.080	6.208	-15.852	1.00	32.20
ATOM	1483	CB	HIS	166	-41.630	8.162	-15.280	1.00	40.62
ATOM	1484	CG	HIS	166	-42.625	8.769	-14.347	1.00	48.92
ATOM	1485	ND1	HIS	166	-42.881	10.125	-14.310	1.00	51.74
ATOM	1486	CD2	HIS	166	-43.367	8.220	-13.355	1.00	51.33
ATOM	1487	CE1	HIS	166	-43.732	10.386	-13.334	1.00	53.49
ATOM	1488	NE2	HIS	166	-44.043	9.246	-12.738	1.00	53.76
ATOM	1489	H	HIS	166	-40.297	9.862	-13.892	1.00	0.00
ATOM	1490	HD1	HIS	166	-42.530	10.857	-14.880	1.00	0.00
ATOM	1491	HE2	HIS	166	-44.652	9.158	-11.974	1.00	0.00
ATOM	1492	N	ILE	167	-38.599	8.369	-16.267	1.00	29.15

461176

ATOM	1493	CA	ILE	167	-37.590	8.069	-17.279	1.00	25.40
ATOM	1494	C	ILE	167	-36.327	7.595	-16.566	1.00	24.71
ATOM	1495	O	ILE	167	-35.659	6.660	-17.007	1.00	25.68
ATOM	1496	CB	ILE	167	-37.249	9.307	-18.127	1.00	22.75
ATOM	1497	CG1	ILE	167	-38.530	10.019	-18.592	1.00	22.09
ATOM	1498	CG2	ILE	167	-36.351	8.910	-19.281	1.00	20.92
ATOM	1499	H	ILE	167	-38.744	9.302	-16.017	1.00	0.00
ATOM	1500	CD	ILE	167	-39.611	9.109	-19.169	1.00	21.21
ATOM	1501	N	CYS	168	-36.023	8.242	-15.449	1.00	22.77
ATOM	1502	CA	CYS	168	-34.864	7.904	-14.644	1.00	20.38
ATOM	1503	C	CYS	168	-34.952	6.467	-14.149	1.00	13.88
ATOM	1504	O	CYS	168	-33.960	5.737	-14.151	1.00	18.67
ATOM	1505	CB	CYS	168	-34.762	8.858	-13.466	1.00	19.86
ATOM	1506	SG	CYS	168	-33.267	8.581	-12.486	1.00	25.34
ATOM	1507	H	CYS	168	-36.547	9.012	-15.155	1.00	0.00
ATOM	1508	N	ASP	169	-36.153	6.062	-13.744	1.00	17.91
ATOM	1509	CA	ASP	169	-36.395	4.708	-13.263	1.00	17.44
ATOM	1510	C	ASP	169	-36.147	3.737	-14.408	1.00	17.43
ATOM	1511	O	ASP	169	-35.489	2.712	-14.237	1.00	18.43
ATOM	1512	CB	ASP	169	-37.839	4.571	-12.768	1.00	18.17
ATOM	1513	CG	ASP	169	-38.093	3.253	-12.073	1.00	18.12
ATOM	1514	OD1	ASP	169	-37.473	2.996	-11.030	1.00	18.81
ATOM	1515	OD2	ASP	169	-38.925	2.468	-12.559	1.00	18.25
ATOM	1516	H	ASP	169	-36.893	6.687	-13.710	1.00	0.00
ATOM	1517	N	ALA	170	-36.655	4.080	-15.586	1.00	16.11
ATOM	1518	CA	ALA	170	-36.477	3.246	-16.763	1.00	14.86
ATOM	1519	C	ALA	170	-34.997	3.079	-17.069	1.00	15.28
ATOM	1520	O	ALA	170	-34.512	1.962	-17.185	1.00	15.95
ATOM	1521	CB	ALA	170	-37.191	3.854	-17.940	1.00	15.63
ATOM	1522	H	ALA	170	-37.200	4.889	-15.640	1.00	0.00
ATOM	1523	N	LYS	171	-34.277	4.193	-17.170	1.00	16.33
ATOM	1524	CA	LYS	171	-32.846	4.155	-17.445	1.00	16.55
ATOM	1525	C	LYS	171	-32.196	3.172	-16.493	1.00	16.60
ATOM	1526	O	LYS	171	-31.487	2.258	-16.918	1.00	16.71
ATOM	1527	CB	LYS	171	-32.214	5.535	-17.264	1.00	17.79
ATOM	1528	CG	LYS	171	-32.353	6.453	-18.463	1.00	20.18
ATOM	1529	CD	LYS	171	-31.370	7.615	-18.380	1.00	22.70
ATOM	1530	CE	LYS	171	-31.228	8.323	-19.715	1.00	25.58
ATOM	1531	NZ	LYS	171	-30.907	7.374	-20.840	1.00	27.76
ATOM	1532	H	LYS	171	-34.737	5.041	-17.056	1.00	0.00
ATOM	1533	HZ1	LYS	171	-31.735	6.769	-20.992	1.00	0.00
ATOM	1534	HZ2	LYS	171	-30.119	6.728	-20.589	1.00	0.00
ATOM	1535	HZ3	LYS	171	-30.690	7.898	-21.716	1.00	0.00
ATOM	1536	N	TYR	172	-32.508	3.325	-15.210	1.00	16.89
ATOM	1537	CA	TYR	172	-31.977	2.453	-14.168	1.00	17.35
ATOM	1538	C	TYR	172	-32.252	0.956	-14.382	1.00	16.66
ATOM	1539	O	TYR	172	-31.430	0.121	-14.014	1.00	16.33
ATOM	1540	CB	TYR	172	-32.478	2.905	-12.791	1.00	16.98
ATOM	1541	CG	TYR	172	-31.436	3.666	-12.009	1.00	16.83
ATOM	1542	CD1	TYR	172	-31.255	5.036	-12.192	1.00	17.77
ATOM	1543	CD2	TYR	172	-30.595	3.006	-11.123	1.00	15.99
ATOM	1544	CE1	TYR	172	-30.257	5.726	-11.519	1.00	16.71
ATOM	1545	CE2	TYR	172	-29.601	3.679	-10.449	1.00	16.10
ATOM	1546	CZ	TYR	172	-29.434	5.036	-10.648	1.00	17.10
ATOM	1547	OH	TYR	172	-28.434	5.678	-9.968	1.00	18.38
ATOM	1548	H	TYR	172	-33.092	4.066	-14.938	1.00	0.00
ATOM	1549	HH	TYR	172	-28.017	5.006	-9.422	1.00	0.00
ATOM	1550	N	HIS	173	-33.390	0.620	-14.982	1.00	15.28
ATOM	1551	CA	HIS	173	-33.723	-0.777	-15.242	1.00	13.36
ATOM	1552	C	HIS	173	-32.921	-1.375	-16.388	1.00	14.24
ATOM	1553	O	HIS	173	-32.788	-2.593	-16.481	1.00	15.44
ATOM	1554	CB	HIS	173	-35.208	-0.937	-15.525	1.00	11.58
ATOM	1555	CG	HIS	173	-36.059	-0.855	-14.304	1.00	10.16

42/126

ATOM	1556	ND1	HIS	173	-36.406	-1.963	-13.566	1.00	10.90
ATOM	1557	CD2	HIS	173	-36.606	0.207	-13.666	1.00	10.92
ATOM	1558	CE1	HIS	173	-37.131	-1.590	-12.528	1.00	11.19
ATOM	1559	NE2	HIS	173	-37.266	-0.278	-12.566	1.00	11.38
ATOM	1560	H	HIS	173	-33.993	1.355	-15.228	1.00	0.00
ATOM	1561	HD1	HIS	173	-36.186	-2.896	-13.801	1.00	0.00
ATOM	1562	HE2	HIS	173	-37.752	0.270	-11.916	1.00	0.00
ATOM	1563	N	LEU	173A	-32.397	-0.532	-17.271	1.00	14.95
ATOM	1564	CA	LEU	173A	-31.604	-1.020	-18.396	1.00	16.44
ATOM	1565	C	LEU	173A	-30.347	-1.717	-17.866	1.00	18.23
ATOM	1566	O	LEU	173A	-29.611	-1.161	-17.044	1.00	18.66
ATOM	1567	CB	LEU	173A	-31.206	0.131	-19.321	1.00	16.19
ATOM	1568	CG	LEU	173A	-32.336	0.973	-19.910	1.00	15.99
ATOM	1569	CD1	LEU	173A	-31.738	2.212	-20.537	1.00	17.46
ATOM	1570	CD2	LEU	173A	-33.149	0.180	-20.925	1.00	14.77
ATOM	1571	H	LEU	173A	-32.529	0.430	-17.142	1.00	0.00
ATOM	1572	N	GLY	173B	-30.103	-2.931	-19.346	1.00	19.99
ATOM	1573	CA	GLY	173B	-28.946	-3.691	-17.903	1.00	19.63
ATOM	1574	C	GLY	173B	-29.175	-4.322	-16.542	1.00	20.10
ATOM	1575	O	GLY	173B	-28.279	-4.966	-16.003	1.00	19.40
ATOM	1576	H	GLY	173B	-30.711	-3.312	-19.002	1.00	0.00
ATOM	1577	N	ALA	173C	-30.380	-4.165	-16.006	1.00	20.43
ATOM	1578	CA	ALA	173C	-30.718	-4.708	-14.706	1.00	21.00
ATOM	1579	C	ALA	173C	-31.678	-5.869	-14.803	1.00	22.51
ATOM	1580	O	ALA	173C	-32.476	-5.946	-15.731	1.00	24.60
ATOM	1581	CB	ALA	173C	-31.310	-3.645	-13.840	1.00	22.16
ATOM	1582	H	ALA	173C	-31.118	-3.729	-16.483	1.00	0.00
ATOM	1583	N	TYR	173D	-31.565	-6.776	-13.834	1.00	23.00
ATOM	1584	CA	TYR	173D	-32.398	-7.967	-13.709	1.00	23.15
ATOM	1585	C	TYR	173D	-33.742	-7.604	-13.780	1.00	23.67
ATOM	1586	O	TYR	173D	-34.718	-8.333	-13.31	1.00	25.70
ATOM	1587	CB	TYR	173D	-31.707	-8.996	-12.301	1.00	22.72
ATOM	1588	CG	TYR	173D	-30.513	-9.713	-13.402	1.00	22.59
ATOM	1589	CD1	TYR	173D	-30.644	-10.463	-14.573	1.00	22.39
ATOM	1590	CD2	TYR	173D	-29.263	-9.675	-12.779	1.00	21.99
ATOM	1591	CE1	TYR	173D	-29.566	-11.165	-15.112	1.00	22.78
ATOM	1592	CE2	TYR	173D	-28.172	-10.379	-13.311	1.00	23.40
ATOM	1593	CZ	TYR	173D	-28.333	-11.121	-14.484	1.00	24.55
ATOM	1594	OH	TYR	173D	-27.261	-11.797	-15.050	1.00	25.95
ATOM	1595	H	TYR	173D	-30.815	-6.671	-13.223	1.00	0.00
ATOM	1596	HH	TYR	173D	-27.539	-12.256	-15.865	1.00	0.00
ATOM	1597	N	THR	173E	-33.777	-6.491	-12.352	1.00	23.43
ATOM	1598	CA	THR	173E	-34.987	-6.025	-11.677	1.00	23.76
ATOM	1599	C	THR	173E	-36.160	-5.755	-12.635	1.00	25.34
ATOM	1600	O	THR	173E	-36.091	-4.873	-13.488	1.00	26.13
ATOM	1601	CB	THR	173E	-34.691	-4.740	-10.877	1.00	21.96
ATOM	1602	OG1	THR	173E	-33.419	-4.865	-10.231	1.00	21.26
ATOM	1603	CG2	THR	173E	-35.753	-4.503	-9.825	1.00	20.44
ATOM	1604	H	THR	173E	-32.974	-5.951	-12.256	1.00	0.00
ATOM	1605	HG1	THR	173E	-33.479	-5.537	-9.537	1.00	0.00
ATOM	1606	N	GLY	173F	-37.245	-6.502	-12.475	1.00	27.04
ATOM	1607	CA	GLY	173F	-38.401	-6.306	-13.326	1.00	29.02
ATOM	1608	C	GLY	173F	-38.864	-4.861	-13.304	1.00	30.11
ATOM	1609	O	GLY	173F	-38.659	-4.153	-12.318	1.00	29.56
ATOM	1610	H	GLY	173F	-37.257	-7.149	-11.737	1.00	0.00
ATOM	1611	N	ASP	173G	-39.468	-4.413	-14.397	1.00	32.21
ATOM	1612	CA	ASP	173G	-39.948	-3.045	-14.498	1.00	33.96
ATOM	1613	C	ASP	173G	-41.110	-2.692	-13.580	1.00	34.60
ATOM	1614	O	ASP	173G	-41.477	-1.514	-13.470	1.00	35.60
ATOM	1615	CB	ASP	173G	-40.269	-2.694	-15.948	1.00	35.61
ATOM	1616	CG	ASP	173G	-39.013	-2.541	-16.795	1.00	37.87
ATOM	1617	OD1	ASP	173G	-38.642	-1.381	-17.110	1.00	38.56
ATOM	1618	OD2	ASP	173G	-38.392	-3.582	-17.118	1.00	36.95

48/126

ATOM	1619	H	ASP	173G	-39.537	-4.977	-15.195	1.00	0.00
ATOM	1620	N	ASP	173H	-41.696	-3.691	-12.923	1.00	34.56
ATOM	1621	CA	ASP	173H	-42.792	-3.425	-11.993	1.00	35.28
ATOM	1622	C	ASP	173H	-42.216	-2.953	-10.657	1.00	33.17
ATOM	1623	O	ASP	173H	-42.876	-2.239	-9.900	1.00	33.75
ATOM	1624	CB	ASP	173H	-43.719	-4.647	-11.820	1.00	39.29
ATOM	1625	CG	ASP	173H	-43.017	-5.857	-11.224	1.00	43.28
ATOM	1626	OD1	ASP	173H	-43.093	-6.047	-9.987	1.00	44.47
ATOM	1627	OD2	ASP	173H	-42.405	-6.629	-11.995	1.00	45.71
ATOM	1628	H	ASP	173H	-41.435	-4.628	-13.053	1.00	0.00
ATOM	1629	N	VAL	173I	-40.952	-3.289	-10.416	1.00	30.51
ATOM	1630	CA	VAL	173I	-40.257	-2.897	-9.198	1.00	28.06
ATOM	1631	C	VAL	173I	-39.718	-1.476	-9.364	1.00	29.63
ATOM	1632	O	VAL	173I	-38.820	-1.233	-10.175	1.00	30.63
ATOM	1633	CB	VAL	173I	-39.074	-3.830	-8.916	1.00	25.68
ATOM	1634	CG1	VAL	173I	-38.437	-3.482	-7.584	1.00	25.28
ATOM	1635	CG2	VAL	173I	-39.530	-5.267	-8.941	1.00	24.85
ATOM	1636	H	VAL	173I	-40.462	-3.827	-11.072	1.00	0.00
ATOM	1637	N	ARG	174	-40.276	-0.537	-8.603	1.00	29.70
ATOM	1638	CA	ARG	174	-39.851	0.859	-8.668	1.00	28.01
ATOM	1639	C	ARG	174	-38.492	1.006	-8.000	1.00	24.47
ATOM	1640	O	ARG	174	-38.342	0.708	-6.820	1.00	25.22
ATOM	1641	CB	ARG	174	-40.875	1.754	-7.962	1.00	32.08
ATOM	1642	CG	ARG	174	-40.902	3.205	-8.428	1.00	37.13
ATOM	1643	CD	ARG	174	-41.765	3.392	-9.680	1.00	43.76
ATOM	1644	NE	ARG	174	-41.246	2.682	-10.856	1.00	49.57
ATOM	1645	CZ	ARG	174	-41.842	1.642	-11.449	1.00	51.72
ATOM	1646	NH1	ARG	174	-42.999	1.167	-10.990	1.00	52.86
ATOM	1647	NH2	ARG	174	-41.267	1.058	-12.496	1.00	52.80
ATOM	1648	H	ARG	174	-40.968	-0.812	-7.966	1.00	0.00
ATOM	1649	HE	ARG	174	-40.387	3.023	-11.219	1.00	0.00
ATOM	1650	HH11	ARG	174	-43.446	1.570	-10.192	1.00	0.00
ATOM	1651	HH12	ARG	174	-43.453	0.373	-11.411	1.00	0.00
ATOM	1652	HH21	ARG	174	-40.380	1.444	-12.791	1.00	0.00
ATOM	1653	HH22	ARG	174	-41.593	0.236	-12.994	1.00	0.00
ATOM	1654	N	ILE	175	-37.500	1.438	-8.760	1.00	21.33
ATOM	1655	CA	ILE	175	-36.162	1.625	-8.230	1.00	18.97
ATOM	1656	C	ILE	175	-35.983	3.037	-7.682	1.00	18.56
ATOM	1657	O	ILE	175	-35.505	3.196	-6.561	1.00	19.95
ATOM	1658	CB	ILE	175	-35.101	1.277	-9.278	1.00	18.53
ATOM	1659	CG1	ILE	175	-35.198	-0.218	-9.609	1.00	18.86
ATOM	1660	CG2	ILE	175	-33.728	1.619	-8.765	1.00	18.13
ATOM	1661	H	ILE	175	-37.664	1.668	-9.689	1.00	0.00
ATOM	1662	CD	ILE	175	-34.332	-0.672	-10.740	1.00	17.87
ATOM	1663	N	VAL	176	-36.342	4.068	-8.442	1.00	17.12
ATOM	1664	CA	VAL	176	-36.218	5.412	-7.891	1.00	18.02
ATOM	1665	C	VAL	176	-37.589	5.870	-7.383	1.00	20.75
ATOM	1666	O	VAL	176	-38.509	6.159	-8.156	1.00	21.89
ATOM	1667	CB	VAL	176	-35.538	6.442	-8.854	1.00	15.79
ATOM	1668	CG1	VAL	176	-34.417	5.782	-9.624	1.00	15.49
ATOM	1669	CG2	VAL	176	-36.524	7.120	-9.762	1.00	13.99
ATOM	1670	H	VAL	176	-36.707	3.901	-9.344	1.00	0.00
ATOM	1671	N	ARG	177	-37.735	5.853	-6.060	1.00	21.95
ATOM	1672	CA	ARG	177	-38.984	6.225	-5.399	1.00	21.76
ATOM	1673	C	ARG	177	-39.401	7.678	-5.646	1.00	20.79
ATOM	1674	O	ARG	177	-38.619	8.490	-6.134	1.00	21.17
ATOM	1675	CB	ARG	177	-38.874	5.981	-3.889	1.00	23.66
ATOM	1676	CG	ARG	177	-38.101	4.728	-3.468	1.00	26.30
ATOM	1677	CD	ARG	177	-38.721	3.453	-4.004	1.00	29.29
ATOM	1678	NE	ARG	177	-38.762	2.396	-2.993	1.00	32.19
ATOM	1679	CZ	ARG	177	-38.026	1.287	-3.025	1.00	33.71
ATOM	1680	NH1	ARG	177	-37.170	1.080	-4.019	1.00	33.86
ATOM	1681	NH2	ARG	177	-38.183	0.362	-2.083	1.00	34.88

ATOM	1682	H	ARG	177	-36.955	5.604	-5.526	1.00	0.00
ATOM	1683	HE	ARG	177	-39.374	2.570	-2.244	1.00	0.00
ATOM	1684	HH11	ARG	177	-37.064	1.758	-4.751	1.00	0.00
ATOM	1685	HH12	ARG	177	-36.538	0.309	-4.128	1.00	0.00
ATOM	1686	HH21	ARG	177	-38.847	0.479	-1.345	1.00	0.00
ATOM	1687	HH22	ARG	177	-37.629	-0.468	-2.105	1.00	0.00
ATOM	1688	N	ASP	178	-40.630	7.999	-5.262	1.00	20.04
ATOM	1689	CA	ASP	178	-41.191	9.336	-5.418	1.00	18.15
ATOM	1690	C	ASP	178	-40.471	10.413	-4.620	1.00	15.72
ATOM	1691	O	ASP	178	-40.574	11.595	-4.935	1.00	15.89
ATOM	1692	CB	ASP	178	-42.658	9.327	-5.004	1.00	21.04
ATOM	1693	CG	ASP	178	-43.567	8.848	-6.098	1.00	24.50
ATOM	1694	OD1	ASP	178	-43.420	7.698	-6.575	1.00	26.28
ATOM	1695	OD2	ASP	178	-44.455	9.635	-6.484	1.00	27.33
ATOM	1696	H	ASP	178	-41.228	7.329	-4.875	1.00	0.00
ATOM	1697	N	ASP	179	-39.783	10.020	-3.558	1.00	14.11
ATOM	1698	CA	ASP	179	-39.071	10.981	-2.731	1.00	12.77
ATOM	1699	C	ASP	179	-37.677	11.268	-3.244	1.00	11.77
ATOM	1700	O	ASP	179	-36.926	12.009	-2.623	1.00	11.43
ATOM	1701	CB	ASP	179	-39.013	10.513	-1.276	1.00	14.68
ATOM	1702	CG	ASP	179	-38.320	9.178	-1.112	1.00	15.98
ATOM	1703	OD1	ASP	179	-38.815	8.170	-1.655	1.00	17.32
ATOM	1704	OD2	ASP	179	-37.291	9.125	-0.412	1.00	16.93
ATOM	1705	H	ASP	179	-39.761	9.075	-3.290	1.00	0.00
ATOM	1706	N	MET	180	-37.351	10.726	-4.412	1.00	12.30
ATOM	1707	CA	MET	180	-36.039	10.925	-5.017	1.00	11.45
ATOM	1708	C	MET	180	-36.146	11.779	-6.268	1.00	13.26
ATOM	1709	O	MET	180	-37.229	11.961	-6.824	1.00	14.48
ATOM	1710	CB	MET	180	-35.414	9.579	-5.357	1.00	9.46
ATOM	1711	CG	MET	180	-35.427	8.619	-4.197	1.00	8.00
ATOM	1712	SD	MET	180	-34.848	7.020	-4.652	1.00	8.13
ATOM	1713	CE	MET	180	-34.880	6.211	-3.094	1.00	8.00
ATOM	1714	H	MET	180	-37.994	10.183	-4.906	1.00	0.00
ATOM	1715	N	LEU	181	-35.017	12.324	-6.689	1.00	15.44
ATOM	1716	CA	LEU	181	-34.937	13.179	-7.864	1.00	17.08
ATOM	1717	C	LEU	181	-33.682	12.757	-8.627	1.00	18.68
ATOM	1718	O	LEU	181	-32.717	12.297	-8.019	1.00	19.99
ATOM	1719	CB	LEU	181	-34.853	14.650	-7.412	1.00	16.58
ATOM	1720	CG	LEU	181	-34.544	15.785	-8.399	1.00	17.04
ATOM	1721	CD1	LEU	181	-35.107	17.098	-7.902	1.00	17.23
ATOM	1722	CD2	LEU	181	-33.055	15.915	-8.600	1.00	17.26
ATOM	1723	H	LEU	181	-34.199	12.161	-6.179	1.00	0.00
ATOM	1724	N	CYS	182	-33.702	12.873	-9.950	1.00	18.96
ATOM	1725	CA	CYS	182	-32.551	12.494	-10.747	1.00	19.50
ATOM	1726	C	CYS	182	-31.983	13.662	-11.504	1.00	21.31
ATOM	1727	O	CYS	182	-32.720	14.528	-11.982	1.00	22.70
ATOM	1728	CB	CYS	182	-32.921	11.423	-11.738	1.00	19.26
ATOM	1729	SG	CYS	182	-33.455	9.889	-10.953	1.00	22.46
ATOM	1730	H	CYS	182	-34.483	13.224	-10.421	1.00	0.00
ATOM	1731	N	ALA	183	-30.668	13.654	-11.641	1.00	21.56
ATOM	1732	CA	ALA	183	-29.958	14.696	-12.344	1.00	22.35
ATOM	1733	C	ALA	183	-28.574	14.167	-12.689	1.00	25.09
ATOM	1734	O	ALA	183	-28.089	13.211	-12.077	1.00	25.38
ATOM	1735	CB	ALA	183	-29.857	15.933	-11.473	1.00	20.35
ATOM	1736	H	ALA	183	-30.153	12.927	-11.220	1.00	0.00
ATOM	1737	N	GLY	184	-27.960	14.764	-13.702	1.00	27.62
ATOM	1738	CA	GLY	184	-26.636	14.344	-14.112	1.00	28.49
ATOM	1739	C	GLY	184	-26.672	13.504	-15.369	1.00	29.74
ATOM	1740	O	GLY	184	-27.743	13.117	-15.856	1.00	29.35
ATOM	1741	H	GLY	184	-28.470	15.423	-14.213	1.00	0.00
ATOM	1742	N	ASN	185	-25.489	13.225	-15.899	1.00	30.82
ATOM	1743	CA	ASN	185	-25.357	12.434	-17.107	1.00	31.75
ATOM	1744	C	ASN	185	-24.021	11.718	-17.121	1.00	32.71

ATOM	1745	O	ASN	185	-23.272	11.753	-16.142	1.00	32.76
ATOM	1746	CB	ASN	185	-25.507	13.316	-18.356	1.00	31.87
ATOM	1747	CG	ASN	185	-24.467	14.418	-18.427	1.00	31.07
ATOM	1748	OD1	ASN	185	-23.343	14.253	-17.973	1.00	31.05
ATOM	1749	ND2	ASN	185	-24.836	15.541	-19.023	1.00	31.34
ATOM	1750	H	ASN	185	-24.680	13.513	-15.432	1.00	0.00
ATOM	1751	HD21	ASN	185	-25.748	15.588	-19.376	1.00	0.00
ATOM	1752	HD22	ASN	185	-24.171	16.253	-19.082	1.00	0.00
ATOM	1753	N	THR	186	-23.692	11.144	-18.270	1.00	33.84
ATOM	1754	CA	THR	186	-22.459	10.393	-18.449	1.00	34.53
ATOM	1755	C	THR	186	-21.183	11.249	-18.532	1.00	36.08
ATOM	1756	O	THR	186	-20.119	10.739	-18.886	1.00	37.14
ATOM	1757	CB	THR	186	-22.579	9.504	-19.703	1.00	33.21
ATOM	1758	OG1	THR	186	-21.572	8.490	-19.683	1.00	34.42
ATOM	1759	CG2	THR	186	-22.438	10.335	-20.962	1.00	34.10
ATOM	1760	H	THR	186	-24.296	11.210	-19.033	1.00	0.00
ATOM	1761	HG1	THR	186	-20.708	8.907	-19.523	1.00	0.00
ATOM	1762	N	ARG	187	-21.286	12.538	-18.205	1.00	36.29
ATOM	1763	CA	ARG	187	-20.144	13.451	-18.261	1.00	36.05
ATOM	1764	C	ARG	187	-20.161	14.441	-17.110	1.00	34.58
ATOM	1765	O	ARG	187	-19.230	15.224	-16.955	1.00	35.60
ATOM	1766	CB	ARG	187	-20.144	14.249	-19.571	1.00	39.86
ATOM	1767	CG	ARG	187	-20.060	13.416	-20.841	1.00	45.36
ATOM	1768	CD	ARG	187	-20.150	14.281	-22.095	1.00	49.61
ATOM	1769	NE	ARG	187	-20.186	13.462	-23.310	1.00	54.73
ATOM	1770	CZ	ARG	187	-19.491	13.712	-24.421	1.00	56.94
ATOM	1771	NH1	ARG	187	-18.690	14.773	-24.492	1.00	58.03
ATOM	1772	NH2	ARG	187	-19.590	12.889	-25.464	1.00	57.38
ATOM	1773	H	ARG	187	-22.126	12.901	-17.895	1.00	0.00
ATOM	1774	HE	ARG	187	-20.782	12.681	-23.245	1.00	0.00
ATOM	1775	HH11	ARG	187	-18.608	15.389	-23.701	1.00	0.00
ATOM	1776	HH12	ARG	187	-18.142	15.011	-25.296	1.00	0.00
ATOM	1777	HH21	ARG	187	-20.185	12.083	-25.418	1.00	0.00
ATOM	1778	HH22	ARG	187	-19.087	13.041	-26.318	1.00	0.00
ATOM	1779	N	ARG	188	-21.238	14.450	-16.339	1.00	32.47
ATOM	1780	CA	ARG	188	-21.368	15.366	-15.215	1.00	30.59
ATOM	1781	C	ARG	188	-22.214	14.684	-14.164	1.00	27.24
ATOM	1782	O	ARG	188	-23.273	14.153	-14.487	1.00	26.98
ATOM	1783	CB	ARG	188	-22.078	16.645	-15.656	1.00	34.39
ATOM	1784	CG	ARG	188	-21.505	17.304	-16.888	1.00	39.02
ATOM	1785	CD	ARG	188	-22.201	18.612	-17.142	1.00	44.49
ATOM	1786	NE	ARG	188	-22.037	19.065	-18.517	1.00	50.18
ATOM	1787	CZ	ARG	188	-23.018	19.590	-19.248	1.00	53.82
ATOM	1788	NH1	ARG	188	-24.238	19.726	-18.724	1.00	54.77
ATOM	1789	NH2	ARG	188	-22.781	19.988	-20.497	1.00	55.95
ATOM	1790	H	ARG	188	-21.994	13.852	-16.502	1.00	0.00
ATOM	1791	HE	ARG	188	-21.117	18.948	-18.849	1.00	0.00
ATOM	1792	HH11	ARG	188	-24.369	19.477	-17.753	1.00	0.00
ATOM	1793	HH12	ARG	188	-25.020	20.118	-19.211	1.00	0.00
ATOM	1794	HH21	ARG	188	-21.864	19.906	-20.897	1.00	0.00
ATOM	1795	HH22	ARG	188	-23.497	20.392	-21.075	1.00	0.00
ATOM	1796	N	ASP	189	-21.790	14.765	-12.910	1.00	24.34
ATOM	1797	CA	ASP	189	-22.509	14.123	-11.816	1.00	22.44
ATOM	1798	C	ASP	189	-21.759	14.378	-10.521	1.00	22.01
ATOM	1799	O	ASP	189	-20.601	14.789	-10.546	1.00	21.55
ATOM	1800	CB	ASP	189	-22.550	12.609	-12.081	1.00	21.45
ATOM	1801	CG	ASP	189	-23.253	11.819	-10.985	1.00	21.83
ATOM	1802	OD1	ASP	189	-24.068	12.380	-10.222	1.00	24.61
ATOM	1803	OD2	ASP	189	-22.999	10.605	-10.906	1.00	19.74
ATOM	1804	H	ASP	189	-20.960	15.245	-12.703	1.00	0.00
ATOM	1805	N	SER	190	-22.441	14.224	-9.393	1.00	22.95
ATOM	1806	CA	SER	190	-21.792	14.370	-8.096	1.00	23.82
ATOM	1807	C	SER	190	-21.041	13.045	-7.926	1.00	24.53

ATOM	1808	O	SER	190	-21.179	12.146	-8.757	1.00	25.46
ATOM	1809	CB	SER	190	-22.823	14.573	-6.972	1.00	23.32
ATOM	1810	OG	SER	190	-23.736	13.491	-6.845	1.00	22.29
ATOM	1811	H	SER	190	-23.390	13.989	-9.443	1.00	0.00
ATOM	1812	HG	SER	190	-23.975	13.143	-7.725	1.00	0.00
ATOM	1813	N	CYS	191	-20.243	12.907	-6.881	1.00	23.49
ATOM	1814	CA	CYS	191	-19.514	11.670	-6.712	1.00	22.82
ATOM	1815	C	CYS	191	-19.243	11.399	-5.236	1.00	23.00
ATOM	1816	O	CYS	191	-19.813	12.055	-4.361	1.00	23.19
ATOM	1817	CB	CYS	191	-18.231	11.710	-7.550	1.00	21.77
ATOM	1818	SG	CYS	191	-17.409	10.103	-7.803	1.00	23.53
ATOM	1819	H	CYS	191	-20.140	13.606	-6.214	1.00	0.00
ATOM	1820	N	GLN	192	-18.418	10.396	-4.958	1.00	23.12
ATOM	1821	CA	GLN	192	-18.091	10.019	-3.589	1.00	23.66
ATOM	1822	C	GLN	192	-17.583	11.218	-2.812	1.00	22.07
ATOM	1823	O	GLN	192	-16.638	11.867	-3.234	1.00	23.86
ATOM	1824	CB	GLN	192	-17.016	8.936	-3.596	1.00	28.11
ATOM	1825	CG	GLN	192	-16.881	8.173	-2.292	1.00	34.86
ATOM	1826	CD	GLN	192	-18.060	7.252	-2.036	1.00	40.16
ATOM	1827	OE1	GLN	192	-18.835	7.460	-1.099	1.00	42.98
ATOM	1828	NE2	GLN	192	-18.207	6.229	-2.876	1.00	42.25
ATOM	1829	H	GLN	192	-17.990	9.901	-5.689	1.00	0.00
ATOM	1830	HE21	GLN	192	-17.554	6.114	-3.599	1.00	0.00
ATOM	1831	HE22	GLN	192	-18.971	5.635	-2.719	1.00	0.00
ATOM	1832	N	GLY	193	-18.229	11.533	-1.698	1.00	19.90
ATOM	1833	CA	GLY	193	-17.784	12.655	-0.894	1.00	18.35
ATOM	1834	C	GLY	193	-18.614	13.911	-1.035	1.00	17.76
ATOM	1835	O	GLY	193	-18.389	14.877	-0.296	1.00	19.03
ATOM	1836	H	GLY	193	-19.016	11.023	-1.421	1.00	0.00
ATOM	1837	N	ASP	194	-19.524	13.926	-2.007	1.00	16.45
ATOM	1838	CA	ASP	194	-20.407	15.068	-2.221	1.00	15.06
ATOM	1839	C	ASP	194	-21.717	14.857	-1.484	1.00	14.80
ATOM	1840	O	ASP	194	-22.484	15.798	-1.308	1.00	15.38
ATOM	1841	CB	ASP	194	-20.705	15.258	-3.703	1.00	15.50
ATOM	1842	CG	ASP	194	-19.497	15.689	-4.487	1.00	16.66
ATOM	1843	OD1	ASP	194	-18.741	16.561	-4.004	1.00	18.05
ATOM	1844	OD2	ASP	194	-19.296	15.154	-5.595	1.00	15.67
ATOM	1845	H	ASP	194	-19.619	13.193	-2.652	1.00	0.00
ATOM	1846	N	SER	195	-21.965	13.618	-1.061	1.00	14.17
ATOM	1847	CA	SER	195	-23.173	13.247	-0.331	1.00	14.15
ATOM	1848	C	SER	195	-23.517	14.283	0.713	1.00	15.35
ATOM	1849	O	SER	195	-22.626	14.848	1.339	1.00	17.03
ATOM	1850	CB	SER	195	-22.999	11.892	0.339	1.00	14.32
ATOM	1851	OG	SER	195	-23.149	10.834	-0.598	1.00	16.17
ATOM	1852	H	SER	195	-21.281	12.979	-1.252	1.00	0.00
ATOM	1853	N	GLY	196	-24.807	14.559	0.869	1.00	16.19
ATOM	1854	CA	GLY	196	-25.247	15.557	1.828	1.00	16.95
ATOM	1855	C	GLY	196	-25.215	16.953	1.234	1.00	19.53
ATOM	1856	O	GLY	196	-25.832	17.876	1.773	1.00	22.52
ATOM	1857	H	GLY	196	-25.457	14.063	0.327	1.00	0.00
ATOM	1858	N	GLY	197	-24.520	17.101	0.107	1.00	19.48
ATOM	1859	CA	GLY	197	-24.402	18.388	-0.564	1.00	17.72
ATOM	1860	C	GLY	197	-25.663	18.813	-1.285	1.00	16.98
ATOM	1861	O	GLY	197	-26.482	17.977	-1.656	1.00	17.29
ATOM	1862	H	GLY	197	-24.047	16.363	-0.314	1.00	0.00
ATOM	1863	N	PRO	198	-25.831	20.116	-1.518	1.00	17.20
ATOM	1864	CA	PRO	198	-26.994	20.681	-2.196	1.00	17.64
ATOM	1865	C	PRO	198	-26.993	20.682	-3.720	1.00	18.82
ATOM	1866	O	PRO	198	-25.971	20.943	-4.353	1.00	20.26
ATOM	1867	CB	PRO	198	-26.991	22.119	-1.686	1.00	17.40
ATOM	1868	CG	PRO	198	-25.541	22.432	-1.642	1.00	15.54
ATOM	1869	CD	PRO	198	-24.992	21.190	-0.954	1.00	17.43
ATOM	1870	N	LEU	199	-28.151	20.379	-4.296	1.00	20.11

ATOM	1871	CA	LEU	199	-28.354	20.435	-5.740	1.00	20.15
ATOM	1872	C	LEU	199	-29.300	21.614	-5.840	1.00	21.06
ATOM	1373	O	LEU	199	-30.475	21.503	-5.484	1.00	20.83
ATOM	1874	CB	LEU	199	-29.057	19.185	-6.275	1.00	19.27
ATOM	1875	CG	LEU	199	-29.697	19.349	-7.665	1.00	18.76
ATOM	1376	CD1	LEU	199	-28.667	19.670	-8.723	1.00	18.01
ATOM	1877	CD2	LEU	199	-30.434	18.094	-8.047	1.00	19.55
ATOM	1878	H	LEU	199	-28.885	20.069	-3.724	1.00	0.00
ATOM	1879	N	VAL	200	-28.777	22.760	-6.246	1.00	22.37
ATOM	1880	CA	VAL	200	-29.592	23.962	-6.358	1.00	23.26
ATOM	1881	C	VAL	200	-30.021	24.242	-7.789	1.00	23.81
ATOM	1882	O	VAL	200	-29.437	23.714	-8.732	1.00	24.03
ATOM	1883	CB	VAL	200	-28.846	25.183	-5.809	1.00	23.69
ATOM	1884	CG1	VAL	200	-28.614	25.020	-4.312	1.00	22.32
ATOM	1885	CG2	VAL	200	-27.518	25.363	-6.553	1.00	24.45
ATOM	1886	H	VAL	200	-27.845	22.737	-6.552	1.00	0.00
ATOM	1887	N	CYS	201	-31.053	25.064	-7.939	1.00	24.78
ATOM	1888	CA	CYS	201	-31.569	25.443	-9.247	1.00	25.34
ATOM	1889	C	CYS	201	-32.029	26.884	-9.185	1.00	27.18
ATOM	1890	O	CYS	201	-32.536	27.346	-8.157	1.00	27.06
ATOM	1891	CB	CYS	201	-32.748	24.568	-9.633	1.00	24.01
ATOM	1892	SG	CYS	201	-32.401	22.798	-9.499	1.00	24.78
ATOM	1893	H	CYS	201	-31.511	25.388	-7.139	1.00	0.00
ATOM	1894	N	LYS	202	-31.813	27.607	-10.273	1.00	29.46
ATOM	1895	CA	LYS	202	-32.209	28.999	-10.337	1.00	32.31
ATOM	1896	C	LYS	202	-33.624	29.049	-10.887	1.00	34.40
ATOM	1897	O	LYS	202	-33.823	29.045	-12.103	1.00	34.96
ATOM	1898	CB	LYS	202	-31.236	29.789	-11.216	1.00	33.16
ATOM	1899	CG	LYS	202	-31.383	31.301	-11.118	1.00	36.87
ATOM	1900	CD	LYS	202	-30.050	32.033	-11.344	1.00	39.46
ATOM	1901	CE	LYS	202	-29.446	31.789	-12.735	1.00	42.10
ATOM	1902	NZ	LYS	202	-30.239	32.373	-13.871	1.00	44.87
ATOM	1903	H	LYS	202	-31.404	27.150	-11.040	1.00	0.00
ATOM	1904	HZ1	LYS	202	-30.307	33.403	-13.751	1.00	0.00
ATOM	1905	HZ2	LYS	202	-31.190	31.952	-13.882	1.00	0.00
ATOM	1906	HZ3	LYS	202	-29.757	32.155	-14.768	1.00	0.00
ATOM	1907	N	VAL	203	-34.601	29.026	-9.984	1.00	36.68
ATOM	1908	CA	VAL	203	-36.014	29.067	-10.353	1.00	38.86
ATOM	1909	C	VAL	203	-36.563	30.477	-10.187	1.00	41.61
ATOM	1910	O	VAL	203	-36.651	30.992	-9.071	1.00	41.93
ATOM	1911	CB	VAL	203	-36.857	28.099	-9.496	1.00	37.56
ATOM	1912	CG1	VAL	203	-38.336	28.267	-9.803	1.00	37.29
ATOM	1913	CG2	VAL	203	-36.438	26.680	-9.765	1.00	38.59
ATOM	1914	H	VAL	203	-34.348	29.049	-9.033	1.00	0.00
ATOM	1915	N	ASN	204	-36.927	31.095	-11.308	1.00	44.67
ATOM	1916	CA	ASN	204	-37.468	32.452	-11.313	1.00	47.09
ATOM	1917	C	ASN	204	-36.478	33.431	-10.672	1.00	46.66
ATOM	1918	O	ASN	204	-36.812	34.147	-9.729	1.00	46.64
ATOM	1919	CB	ASN	204	-38.820	32.486	-10.582	1.00	50.73
ATOM	1920	CG	ASN	204	-39.581	33.790	-10.801	1.00	54.29
ATOM	1921	OD1	ASN	204	-39.253	34.578	-11.693	1.00	55.94
ATOM	1922	ND2	ASN	204	-40.623	34.008	-9.999	1.00	55.44
ATOM	1923	H	ASN	204	-36.828	30.624	-12.159	1.00	0.00
ATOM	1924	HD21	ASN	204	-40.851	33.345	-9.317	1.00	0.00
ATOM	1925	HD22	ASN	204	-41.101	34.848	-10.144	1.00	0.00
ATOM	1926	N	GLY	205	-35.237	33.402	-11.153	1.00	46.17
ATOM	1927	CA	GLY	205	-34.210	34.294	-10.636	1.00	46.09
ATOM	1928	C	GLY	205	-33.576	33.960	-9.290	1.00	45.77
ATOM	1929	O	GLY	205	-32.503	34.476	-8.964	1.00	46.28
ATOM	1930	H	GLY	205	-35.033	32.759	-11.856	1.00	0.00
ATOM	1931	N	THR	206	-34.213	33.105	-8.502	1.00	44.07
ATOM	1932	CA	THR	206	-33.664	32.749	-7.204	1.00	41.60
ATOM	1933	C	THR	206	-33.090	31.330	-7.130	1.00	38.47

531176

ATOM	1934	O	THR	206	-33.393	30.470	-7.967	1.00	36.60
ATOM	1935	CB	THR	206	-34.700	32.987	-6.084	1.00	42.90
ATOM	1936	OG1	THR	206	-35.980	32.478	-6.488	1.00	44.64
ATOM	1937	CG2	THR	206	-34.828	34.475	-5.800	1.00	43.50
ATOM	1938	H	THR	206	-35.082	32.705	-8.730	1.00	0.00
ATOM	1939	HG1	THR	206	-36.583	32.516	-5.736	1.00	0.00
ATOM	1940	N	TRP	207	-32.211	31.123	-6.151	1.00	35.21
ATOM	1941	CA	TRP	207	-31.566	29.835	-5.922	1.00	30.48
ATOM	1942	C	TRP	207	-32.353	29.030	-4.913	1.00	27.89
ATOM	1943	O	TRP	207	-32.456	29.410	-3.738	1.00	27.82
ATOM	1944	CB	TRP	207	-30.146	30.028	-5.388	1.00	28.99
ATOM	1945	CG	TRP	207	-29.141	30.331	-6.437	1.00	26.88
ATOM	1946	CD1	TRP	207	-28.345	31.432	-6.515	1.00	27.09
ATOM	1947	CD2	TRP	207	-28.813	29.516	-7.562	1.00	25.96
ATOM	1948	NE1	TRP	207	-27.538	31.352	-7.622	1.00	27.02
ATOM	1949	CE2	TRP	207	-27.807	30.186	-8.284	1.00	25.40
ATOM	1950	CE3	TRP	207	-29.271	28.281	-8.030	1.00	26.67
ATOM	1951	CZ2	TRP	207	-27.252	29.665	-9.449	1.00	26.59
ATOM	1952	CZ3	TRP	207	-28.720	27.759	-9.189	1.00	27.44
ATOM	1953	CH2	TRP	207	-27.721	28.452	-9.886	1.00	27.93
ATOM	1954	H	TRP	207	-31.995	31.863	-5.555	1.00	0.00
ATOM	1955	HE1	TRP	207	-26.869	32.027	-7.859	1.00	0.00
ATOM	1956	N	LEU	208	-32.932	27.936	-5.380	1.00	23.96
ATOM	1957	CA	LEU	208	-33.702	27.066	-4.515	1.00	20.83
ATOM	1958	C	LEU	208	-32.956	25.758	-4.465	1.00	19.72
ATOM	1959	O	LEU	208	-32.316	25.372	-5.442	1.00	20.15
ATOM	1960	CB	LEU	208	-35.083	26.805	-5.105	1.00	19.19
ATOM	1961	CG	LEU	208	-35.981	27.989	-5.421	1.00	17.61
ATOM	1962	CD1	LEU	208	-37.280	27.460	-5.994	1.00	17.00
ATOM	1963	CD2	LEU	208	-36.225	28.801	-4.168	1.00	16.01
ATOM	1964	H	LEU	208	-32.833	27.711	-6.326	1.00	0.00
ATOM	1965	N	GLN	209	-32.990	25.102	-3.316	1.00	18.47
ATOM	1966	CA	GLN	209	-32.335	23.816	-3.180	1.00	18.83
ATOM	1967	C	GLN	209	-33.379	22.802	-3.609	1.00	18.98
ATOM	1968	O	GLN	209	-34.454	22.755	-3.043	1.00	20.94
ATOM	1969	CB	GLN	209	-31.898	23.579	-1.730	1.00	19.64
ATOM	1970	CG	GLN	209	-31.166	22.252	-1.519	1.00	21.33
ATOM	1971	CD	GLN	209	-30.323	22.200	-0.251	1.00	21.20
ATOM	1972	OE1	GLN	209	-29.552	21.261	-0.055	1.00	21.45
ATOM	1973	NE2	GLN	209	-30.454	23.205	0.604	1.00	20.21
ATOM	1974	H	GLN	209	-33.435	25.549	-2.566	1.00	0.00
ATOM	1975	HE21	GLN	209	-31.049	23.969	0.491	1.00	0.00
ATOM	1976	HE22	GLN	209	-29.865	23.056	1.378	1.00	0.00
ATOM	1977	N	ALA	210	-33.088	22.028	-4.642	1.00	18.93
ATOM	1978	CA	ALA	210	-34.038	21.039	-5.128	1.00	18.52
ATOM	1979	C	ALA	210	-33.884	19.710	-4.412	1.00	18.46
ATOM	1980	O	ALA	210	-34.877	19.068	-4.057	1.00	19.26
ATOM	1981	CB	ALA	210	-33.860	20.842	-6.615	1.00	20.42
ATOM	1982	H	ALA	210	-32.212	22.074	-5.068	1.00	0.00
ATOM	1983	N	GLY	211	-32.633	19.295	-4.222	1.00	17.60
ATOM	1984	CA	GLY	211	-32.362	18.033	-3.561	1.00	16.03
ATOM	1985	C	GLY	211	-31.060	17.966	-2.783	1.00	15.45
ATOM	1986	O	GLY	211	-30.276	18.919	-2.740	1.00	16.21
ATOM	1987	H	GLY	211	-31.891	19.864	-4.517	1.00	0.00
ATOM	1988	N	VAL	212	-30.839	16.823	-2.152	1.00	14.53
ATOM	1989	CA	VAL	212	-29.643	16.592	-1.361	1.00	14.41
ATOM	1990	C	VAL	212	-28.975	15.321	-1.895	1.00	14.88
ATOM	1991	O	VAL	212	-29.623	14.282	-1.991	1.00	16.66
ATOM	1992	CB	VAL	212	-30.014	16.387	0.117	1.00	14.48
ATOM	1993	CG1	VAL	212	-28.775	16.243	0.956	1.00	16.33
ATOM	1994	CG2	VAL	212	-30.844	17.545	0.618	1.00	15.27
ATOM	1995	H	VAL	212	-31.525	16.129	-2.211	1.00	0.00
ATOM	1996	N	VAL	213	-27.697	15.412	-2.257	1.00	13.68

54/176

ATOM	1997	CA	VAL	213	-26.940	14.276	-2.794	1.00	13.67
ATOM	1998	C	VAL	213	-27.112	12.999	-1.967	1.00	15.32
ATOM	1999	O	VAL	213	-26.620	12.919	-0.841	1.00	17.27
ATOM	2000	CB	VAL	213	-25.443	14.607	-2.875	1.00	12.33
ATOM	2001	CG1	VAL	213	-24.684	13.445	-3.477	1.00	11.91
ATOM	2002	CG2	VAL	213	-25.234	15.865	-3.694	1.00	11.58
ATOM	2003	H	VAL	213	-27.280	16.294	-2.134	1.00	0.00
ATOM	2004	N	SER	214	-27.759	11.991	-2.549	1.00	15.85
ATOM	2005	CA	SER	214	-28.026	10.735	-1.854	1.00	16.61
ATOM	2006	C	SER	214	-27.187	9.532	-2.325	1.00	18.01
ATOM	2007	O	SER	214	-26.145	9.242	-1.738	1.00	18.73
ATOM	2008	CB	SER	214	-29.531	10.435	-1.921	1.00	15.37
ATOM	2009	OG	SER	214	-29.879	9.252	-1.227	1.00	15.13
ATOM	2010	H	SER	214	-28.038	12.025	-3.489	1.00	0.00
ATOM	2011	HG	SER	214	-29.747	9.329	-0.267	1.00	0.00
ATOM	2012	N	TRP	215	-27.632	8.842	-3.374	1.00	18.75
ATOM	2013	CA	TRP	215	-26.927	7.663	-3.890	1.00	19.80
ATOM	2014	C	TRP	215	-26.723	7.645	-5.414	1.00	22.23
ATOM	2015	O	TRP	215	-26.934	8.657	-6.095	1.00	23.25
ATOM	2016	CB	TRP	215	-27.632	6.367	-3.444	1.00	18.77
ATOM	2017	CG	TRP	215	-29.060	6.176	-3.943	1.00	16.71
ATOM	2018	CD1	TRP	215	-30.158	6.912	-3.592	1.00	16.79
ATOM	2019	CD2	TRP	215	-29.532	5.164	-4.849	1.00	14.73
ATOM	2020	NE1	TRP	215	-31.275	6.420	-4.217	1.00	16.69
ATOM	2021	CE2	TRP	215	-30.920	5.351	-4.998	1.00	14.96
ATOM	2022	CE3	TRP	215	-28.914	4.114	-5.543	1.00	15.88
ATOM	2023	CZ2	TRP	215	-31.709	4.525	-5.820	1.00	14.57
ATOM	2024	CZ3	TRP	215	-29.701	3.290	-6.360	1.00	14.45
ATOM	2025	CH2	TRP	215	-31.082	3.505	-6.489	1.00	13.05
ATOM	2026	H	TRP	215	-28.431	9.140	-3.848	1.00	0.00
ATOM	2027	HE1	TRP	215	-32.189	6.755	-4.076	1.00	0.00
ATOM	2028	N	GLY	216	-26.297	6.494	-5.931	1.00	22.70
ATOM	2029	CA	GLY	216	-26.056	6.339	-7.355	1.00	24.31
ATOM	2030	C	GLY	216	-25.271	5.066	-7.606	1.00	26.62
ATOM	2031	O	GLY	216	-24.638	4.555	-6.683	1.00	26.51
ATOM	2032	H	GLY	216	-26.112	5.721	-5.359	1.00	0.00
ATOM	2033	N	GLU	217	-25.357	4.523	-8.817	1.00	28.89
ATOM	2034	CA	GLU	217	-24.637	3.301	-9.169	1.00	30.51
ATOM	2035	C	GLU	217	-23.277	3.689	-9.731	1.00	30.83
ATOM	2036	O	GLU	217	-22.945	3.327	-10.856	1.00	32.11
ATOM	2037	CB	GLU	217	-25.403	2.517	-10.240	1.00	33.50
ATOM	2038	CG	GLU	217	-26.856	2.197	-9.906	1.00	37.89
ATOM	2039	CD	GLU	217	-27.040	0.848	-9.240	1.00	39.20
ATOM	2040	OE1	GLU	217	-26.672	0.706	-8.058	1.00	42.18
ATOM	2041	OE2	GLU	217	-27.578	-0.077	-9.881	1.00	38.06
ATOM	2042	H	GLU	217	-25.951	4.939	-9.480	1.00	0.00
ATOM	2043	N	GLY	219	-22.491	4.417	-8.942	1.00	30.52
ATOM	2044	CA	GLY	219	-21.183	4.864	-9.393	1.00	29.85
ATOM	2045	C	GLY	219	-21.199	6.361	-9.651	1.00	28.86
ATOM	2046	O	GLY	219	-22.056	7.067	-9.125	1.00	29.70
ATOM	2047	H	GLY	219	-22.763	4.656	-8.030	1.00	0.00
ATOM	2048	N	CYS	220	-20.255	6.849	-10.445	1.00	27.30
ATOM	2049	CA	CYS	220	-20.183	8.270	-10.765	1.00	26.59
ATOM	2050	C	CYS	220	-20.171	8.489	-12.274	1.00	27.01
ATOM	2051	O	CYS	220	-19.342	7.921	-12.978	1.00	27.63
ATOM	2052	CB	CYS	220	-18.931	8.895	-10.145	1.00	25.63
ATOM	2053	SG	CYS	220	-18.899	8.829	-8.329	1.00	24.76
ATOM	2054	H	CYS	220	-19.543	6.287	-10.815	1.00	0.00
ATOM	2055	N	ALA	221	-21.101	9.302	-12.763	1.00	27.64
ATOM	2056	CA	ALA	221	-21.218	9.622	-14.184	1.00	27.24
ATOM	2057	C	ALA	221	-21.188	8.373	-15.040	1.00	28.05
ATOM	2058	O	ALA	221	-20.558	8.339	-16.099	1.00	29.91
ATOM	2059	CB	ALA	221	-20.119	10.579	-14.606	1.00	27.26

55/176

ATOM	2060	H	ALA	221	-21.739	9.714	-12.134	1.00	0.00
ATOM	2061	N	GLN	221A	-21.853	7.332	-14.563	1.00	28.12
ATOM	2062	CA	GLN	221A	-21.904	6.086	-15.297	1.00	27.89
ATOM	2063	C	GLN	221A	-23.113	6.053	-16.199	1.00	25.66
ATOM	2064	O	GLN	221A	-24.199	6.472	-15.811	1.00	26.52
ATOM	2065	CB	GLN	221A	-21.945	4.900	-14.347	1.00	30.43
ATOM	2066	CG	GLN	221A	-20.590	4.309	-14.085	1.00	34.17
ATOM	2067	CD	GLN	221A	-20.683	3.020	-13.314	1.00	38.53
ATOM	2068	OE1	GLN	221A	-21.690	2.309	-13.383	1.00	39.33
ATOM	2069	NE2	GLN	221A	-19.632	2.703	-12.566	1.00	41.61
ATOM	2070	H	GLN	221A	-22.361	7.423	-13.730	1.00	0.00
ATOM	2071	HE21	GLN	221A	-18.875	3.322	-12.536	1.00	0.00
ATOM	2072	HE22	GLN	221A	-19.692	1.857	-12.082	1.00	0.00
ATOM	2073	N	PRO	222	-22.940	5.546	-17.418	1.00	23.92
ATOM	2074	CA	PRO	222	-23.998	5.434	-18.418	1.00	24.23
ATOM	2075	C	PRO	222	-25.267	4.778	-17.866	1.00	24.53
ATOM	2076	O	PRO	222	-25.214	3.679	-17.318	1.00	25.97
ATOM	2077	CB	PRO	222	-23.351	4.544	-19.473	1.00	24.60
ATOM	2078	CG	PRO	222	-21.927	4.947	-19.403	1.00	25.12
ATOM	2079	CD	PRO	222	-21.678	4.992	-17.930	1.00	24.30
ATOM	2080	N	ASN	223	-26.395	5.466	-18.019	1.00	24.28
ATOM	2081	CA	ASN	223	-27.709	4.993	-17.581	1.00	24.70
ATOM	2082	C	ASN	223	-27.979	4.903	-16.091	1.00	24.56
ATOM	2083	O	ASN	223	-28.965	4.291	-15.667	1.00	26.39
ATOM	2084	CB	ASN	223	-28.058	3.669	-18.248	1.00	26.24
ATOM	2085	CG	ASN	223	-28.585	3.853	-19.644	1.00	27.52
ATOM	2086	OD1	ASN	223	-29.115	4.916	-19.989	1.00	29.20
ATOM	2087	ND2	ASN	223	-28.464	2.822	-20.457	1.00	28.84
ATOM	2088	H	ASN	223	-26.346	6.344	-18.442	1.00	0.00
ATOM	2089	HD21	ASN	223	-28.045	2.016	-20.087	1.00	0.00
ATOM	2090	HD22	ASN	223	-28.780	2.888	-21.377	1.00	0.00
ATOM	2091	N	ARG	224	-27.109	5.504	-15.296	1.00	22.65
ATOM	2092	CA	ARG	224	-27.271	5.508	-13.854	1.00	21.59
ATOM	2093	C	ARG	224	-27.132	6.954	-13.403	1.00	21.52
ATOM	2094	O	ARG	224	-26.072	7.366	-12.923	1.00	23.00
ATOM	2095	CB	ARG	224	-26.183	4.653	-13.209	1.00	21.30
ATOM	2096	CG	ARG	224	-26.100	3.248	-13.767	1.00	20.28
ATOM	2097	CD	ARG	224	-27.446	2.572	-13.710	1.00	17.59
ATOM	2098	NE	ARG	224	-27.359	1.149	-13.986	1.00	14.62
ATOM	2099	CZ	ARG	224	-28.133	0.513	-14.857	1.00	14.61
ATOM	2100	NH1	ARG	224	-29.043	1.188	-15.557	1.00	13.22
ATOM	2101	NH2	ARG	224	-28.042	-0.808	-14.972	1.00	13.90
ATOM	2102	H	ARG	224	-26.287	5.922	-15.626	1.00	0.00
ATOM	2103	HE	ARG	224	-26.664	0.657	-13.479	1.00	0.00
ATOM	2104	HH11	ARG	224	-29.184	2.177	-15.478	1.00	0.00
ATOM	2105	HH12	ARG	224	-29.625	0.692	-16.207	1.00	0.00
ATOM	2106	HH21	ARG	224	-27.488	-1.374	-14.351	1.00	0.00
ATOM	2107	HH22	ARG	224	-28.666	-1.283	-15.586	1.00	0.00
ATOM	2108	N	PRO	225	-28.177	7.764	-13.619	1.00	20.05
ATOM	2109	CA	PRO	225	-28.142	9.176	-13.225	1.00	19.00
ATOM	2110	C	PRO	225	-27.960	9.334	-11.710	1.00	18.85
ATOM	2111	O	PRO	225	-28.180	8.381	-10.947	1.00	18.87
ATOM	2112	CB	PRO	225	-29.508	9.690	-13.680	1.00	19.40
ATOM	2113	CG	PRO	225	-29.894	8.742	-14.788	1.00	19.39
ATOM	2114	CD	PRO	225	-29.463	7.423	-14.247	1.00	19.45
ATOM	2115	N	GLY	226	-27.561	10.528	-11.279	1.00	16.97
ATOM	2116	CA	GLY	226	-27.362	10.767	-9.864	1.00	14.75
ATOM	2117	C	GLY	226	-28.711	10.884	-9.195	1.00	14.13
ATOM	2118	O	GLY	226	-29.627	11.488	-9.766	1.00	14.36
ATOM	2119	H	GLY	226	-27.436	11.301	-11.865	1.00	0.00
ATOM	2120	N	ILE	227	-28.862	10.272	-8.022	1.00	13.51
ATOM	2121	CA	ILE	227	-30.122	10.338	-7.288	1.00	11.82
ATOM	2122	C	ILE	227	-29.941	11.290	-6.117	1.00	12.42

56/176

ATOM	2123	O	ILE	227	-28.919	11.265	-5.431	1.00	12.50
ATOM	2124	CB	ILE	227	-30.564	8.970	-6.754	1.00	10.14
ATOM	2125	CG1	ILE	227	-30.491	7.914	-7.863	1.00	10.02
ATOM	2126	CG2	ILE	227	-31.961	9.070	-6.162	1.00	8.00
ATOM	2127	H	ILE	227	-28.129	9.777	-7.603	1.00	0.00
ATOM	2128	CD	ILE	227	-31.155	8.318	-9.162	1.00	10.22
ATOM	2129	N	TYR	228	-30.911	12.171	-5.934	1.00	12.70
ATOM	2130	CA	TYR	228	-30.877	13.153	-4.865	1.00	14.33
ATOM	2131	C	TYR	228	-32.193	13.052	-4.106	1.00	15.62
ATOM	2132	O	TYR	228	-33.197	12.609	-4.652	1.00	17.70
ATOM	2133	CB	TYR	228	-30.737	14.571	-5.445	1.00	14.73
ATOM	2134	CG	TYR	228	-29.502	14.806	-6.295	1.00	14.85
ATOM	2135	CD1	TYR	228	-29.272	14.055	-7.443	1.00	16.42
ATOM	2136	CD2	TYR	228	-28.556	15.764	-5.940	1.00	14.70
ATOM	2137	CE1	TYR	228	-28.130	14.241	-8.214	1.00	17.69
ATOM	2138	CE2	TYR	228	-27.410	15.961	-6.706	1.00	15.13
ATOM	2139	CZ	TYR	228	-27.203	15.192	-7.840	1.00	16.67
ATOM	2140	OH	TYR	228	-26.062	15.334	-8.593	1.00	17.66
ATOM	2141	H	TYR	228	-31.654	12.164	-6.559	1.00	0.00
ATOM	2142	HH	TYR	228	-25.499	15.977	-8.168	1.00	0.00
ATOM	2143	N	THR	229	-32.176	13.430	-2.837	1.00	14.78
ATOM	2144	CA	THR	229	-33.374	13.401	-2.032	1.00	14.18
ATOM	2145	C	THR	229	-34.163	14.617	-2.457	1.00	15.59
ATOM	2146	O	THR	229	-33.646	15.735	-2.408	1.00	16.40
ATOM	2147	CB	THR	229	-33.037	13.540	-0.556	1.00	13.98
ATOM	2148	OG1	THR	229	-31.932	12.688	-0.249	1.00	15.24
ATOM	2149	CG2	THR	229	-34.221	13.126	0.294	1.00	15.09
ATOM	2150	H	THR	229	-31.335	13.707	-2.436	1.00	0.00
ATOM	2151	HG1	THR	229	-31.083	13.131	-0.319	1.00	0.00
ATOM	2152	N	ARG	230	-35.398	14.400	-2.896	1.00	16.90
ATOM	2153	CA	ARG	230	-36.256	15.492	-3.337	1.00	18.50
ATOM	2154	C	ARG	230	-36.680	16.284	-2.104	1.00	20.13
ATOM	2155	O	ARG	230	-37.521	15.833	-1.326	1.00	21.66
ATOM	2156	CB	ARG	230	-37.474	14.938	-4.074	1.00	17.41
ATOM	2157	CG	ARG	230	-38.252	15.981	-4.833	1.00	18.25
ATOM	2158	CD	ARG	230	-39.242	15.349	-5.791	1.00	19.18
ATOM	2159	NE	ARG	230	-39.194	16.003	-7.096	1.00	20.74
ATOM	2160	CZ	ARG	230	-38.796	15.398	-8.208	1.00	22.85
ATOM	2161	NH1	ARG	230	-38.425	14.124	-8.168	1.00	24.02
ATOM	2162	NH2	ARG	230	-38.699	16.082	-9.340	1.00	24.49
ATOM	2163	H	ARG	230	-35.770	13.496	-2.857	1.00	0.00
ATOM	2164	HE	ARG	230	-39.467	16.949	-7.119	1.00	0.00
ATOM	2165	HH1	ARG	230	-38.419	13.561	-7.330	1.00	0.00
ATOM	2166	HH2	ARG	230	-38.147	13.602	-8.987	1.00	0.00
ATOM	2167	HH2	ARG	230	-38.897	17.070	-9.444	1.00	0.00
ATOM	2168	HH2	ARG	230	-38.385	15.644	-10.188	1.00	0.00
ATOM	2169	N	VAL	231	-36.106	17.473	-1.944	1.00	20.07
ATOM	2170	CA	VAL	231	-36.383	18.318	-0.795	1.00	19.37
ATOM	2171	C	VAL	231	-37.842	18.701	-0.567	1.00	20.92
ATOM	2172	O	VAL	231	-38.301	18.664	0.570	1.00	22.84
ATOM	2173	CB	VAL	231	-35.485	19.562	-0.798	1.00	18.36
ATOM	2174	CG1	VAL	231	-35.830	20.484	0.352	1.00	17.59
ATOM	2175	CG2	VAL	231	-34.046	19.133	-0.679	1.00	18.89
ATOM	2176	H	VAL	231	-35.526	17.822	-2.653	1.00	0.00
ATOM	2177	N	THR	232	-38.592	19.032	-1.618	1.00	22.13
ATOM	2178	CA	THR	232	-40.003	19.406	-1.428	1.00	22.78
ATOM	2179	C	THR	232	-40.817	18.329	-0.692	1.00	21.93
ATOM	2180	O	THR	232	-41.702	18.649	0.104	1.00	21.21
ATOM	2181	CB	THR	232	-40.718	19.806	-2.773	1.00	23.61
ATOM	2182	OG1	THR	232	-40.517	18.797	-3.775	1.00	24.69
ATOM	2183	CG2	THR	232	-40.202	21.145	-3.289	1.00	23.76
ATOM	2184	H	THR	232	-38.233	19.038	-2.526	1.00	0.00
ATOM	2185	HG1	THR	232	-40.723	19.294	-4.589	1.00	0.00

52/176

ATOM	2186	N	TYR	233	-40.430	17.068	-0.885	1.00	22.13
ATOM	2187	CA	TYR	233	-41.100	15.905	-0.285	1.00	21.64
ATOM	2188	C	TYR	233	-41.059	15.890	1.248	1.00	22.23
ATOM	2189	O	TYR	233	-41.997	15.414	1.900	1.00	23.30
ATOM	2190	CB	TYR	233	-40.461	14.620	-0.830	1.00	20.12
ATOM	2191	CG	TYR	233	-41.255	13.345	-0.639	1.00	20.42
ATOM	2192	CD1	TYR	233	-41.793	12.670	-1.730	1.00	20.53
ATOM	2193	CD2	TYR	233	-41.417	12.778	0.620	1.00	21.24
ATOM	2194	CE1	TYR	233	-42.467	11.462	-1.573	1.00	20.50
ATOM	2195	CE2	TYR	233	-42.089	11.574	0.789	1.00	21.23
ATOM	2196	CZ	TYR	233	-42.610	10.920	-0.312	1.00	21.44
ATOM	2197	OH	TYR	233	-43.272	9.726	-0.134	1.00	23.83
ATOM	2198	H	TYR	233	-39.636	16.905	-1.431	1.00	0.00
ATOM	2199	HH	TYR	233	-43.635	9.360	-0.962	1.00	0.00
ATOM	2200	N	TYR	234	-39.980	16.423	1.816	1.00	21.17
ATOM	2201	CA	TYR	234	-39.799	16.448	3.262	1.00	18.57
ATOM	2202	C	TYR	234	-39.844	17.850	3.846	1.00	19.36
ATOM	2203	O	TYR	234	-39.351	18.073	4.951	1.00	20.52
ATOM	2204	CB	TYR	234	-38.465	15.791	3.623	1.00	15.70
ATOM	2205	CG	TYR	234	-38.396	14.343	3.226	1.00	13.09
ATOM	2206	CD1	TYR	234	-37.601	13.921	2.162	1.00	10.69
ATOM	2207	CD2	TYR	234	-39.173	13.398	3.885	1.00	13.26
ATOM	2208	CE1	TYR	234	-37.593	12.592	1.763	1.00	9.73
ATOM	2209	CE2	TYR	234	-39.172	12.067	3.495	1.00	12.18
ATOM	2210	CZ	TYR	234	-38.386	11.670	2.436	1.00	11.33
ATOM	2211	OH	TYR	234	-38.415	10.349	2.053	1.00	12.19
ATOM	2212	H	TYR	234	-39.296	16.846	1.255	1.00	0.00
ATOM	2213	HH	TYR	234	-39.230	9.921	2.315	1.00	0.00
ATOM	2214	N	LEU	235	-40.484	18.777	3.146	1.00	19.94
ATOM	2215	CA	LEU	235	-40.556	20.150	3.622	1.00	22.71
ATOM	2216	C	LEU	235	-41.166	20.337	5.004	1.00	26.74
ATOM	2217	O	LEU	235	-40.578	21.015	5.846	1.00	28.36
ATOM	2218	CB	LEU	235	-41.278	21.039	2.616	1.00	21.13
ATOM	2219	CG	LEU	235	-40.398	21.688	1.551	1.00	19.17
ATOM	2220	CD1	LEU	235	-41.288	22.370	0.542	1.00	17.42
ATOM	2221	CD2	LEU	235	-39.429	22.671	2.185	1.00	16.49
ATOM	2222	H	LEU	235	-40.918	18.542	2.295	1.00	0.00
ATOM	2223	N	ASP	236	-42.336	19.755	5.250	1.00	30.41
ATOM	2224	CA	ASP	236	-42.978	19.910	6.555	1.00	33.46
ATOM	2225	C	ASP	236	-42.112	19.336	7.667	1.00	31.07
ATOM	2226	O	ASP	236	-41.904	19.980	8.695	1.00	32.26
ATOM	2227	CB	ASP	236	-44.369	19.266	6.576	1.00	40.96
ATOM	2228	CG	ASP	236	-45.112	19.504	7.902	1.00	47.92
ATOM	2229	OD1	ASP	236	-45.024	20.624	8.470	1.00	49.63
ATOM	2230	OD2	ASP	236	-45.780	18.556	8.385	1.00	51.27
ATOM	2231	H	ASP	236	-42.779	19.227	4.561	1.00	0.00
ATOM	2232	N	TRP	237	-41.583	18.138	7.446	1.00	27.60
ATOM	2233	CA	TRP	237	-40.718	17.495	8.427	1.00	25.41
ATOM	2234	C	TRP	237	-39.588	18.466	8.783	1.00	26.42
ATOM	2235	O	TRP	237	-39.330	18.735	9.964	1.00	25.41
ATOM	2236	CB	TRP	237	-40.150	16.194	7.857	1.00	22.16
ATOM	2237	CG	TRP	237	-39.293	15.454	8.822	1.00	18.39
ATOM	2238	CD1	TRP	237	-39.711	14.640	9.831	1.00	18.35
ATOM	2239	CD2	TRP	237	-37.870	15.495	8.901	1.00	15.74
ATOM	2240	NE1	TRP	237	-38.632	14.179	10.542	1.00	16.42
ATOM	2241	CE2	TRP	237	-37.489	14.687	9.991	1.00	15.10
ATOM	2242	CE3	TRP	237	-36.879	16.141	8.157	1.00	14.45
ATOM	2243	CZ2	TRP	237	-36.161	14.504	10.356	1.00	15.23
ATOM	2244	CZ3	TRP	237	-35.561	15.962	8.520	1.00	14.94
ATOM	2245	CH2	TRP	237	-35.211	15.149	9.612	1.00	15.76
ATOM	2246	H	TRP	237	-41.807	17.685	6.611	1.00	0.00
ATOM	2247	HE1	TRP	237	-38.689	13.658	11.374	1.00	0.00
ATOM	2248	N	ILE	238	-38.947	19.011	7.751	1.00	27.11

58/176

ATOM	2249	CA	ILE	238	-37.871	19.979	7.928	1.00	27.21
ATOM	2250	C	ILE	238	-38.415	21.102	8.792	1.00	28.94
ATOM	2251	O	ILE	238	-37.873	21.403	9.849	1.00	29.26
ATOM	2252	CB	ILE	238	-37.422	20.588	6.569	1.00	24.63
ATOM	2253	CG1	ILE	238	-36.730	19.531	5.710	1.00	23.19
ATOM	2254	CG2	ILE	238	-36.499	21.765	6.796	1.00	23.54
ATOM	2255	H	ILE	238	-39.168	18.732	6.837	1.00	0.00
ATOM	2256	CD	ILE	238	-36.514	19.951	4.282	1.00	20.94
ATOM	2257	N	HIS	239	-39.539	21.667	8.367	1.00	31.87
ATOM	2258	CA	HIS	239	-40.155	22.770	9.084	1.00	36.00
ATOM	2259	C	HIS	239	-40.585	22.451	10.499	1.00	38.31
ATOM	2260	O	HIS	239	-40.769	23.355	11.308	1.00	39.77
ATOM	2261	CB	HIS	239	-41.292	23.388	8.267	1.00	37.85
ATOM	2262	CG	HIS	239	-40.805	24.234	7.130	1.00	41.11
ATOM	2263	ND1	HIS	239	-39.756	25.122	7.263	1.00	42.70
ATOM	2264	CD2	HIS	239	-41.179	24.290	5.829	1.00	42.19
ATOM	2265	CE1	HIS	239	-39.498	25.681	6.094	1.00	42.65
ATOM	2266	NE2	HIS	239	-40.347	25.194	5.207	1.00	44.13
ATOM	2267	H	HIS	239	-39.954	21.331	7.554	1.00	0.00
ATOM	2268	HD1	HIS	239	-39.283	25.298	8.117	1.00	0.00
ATOM	2269	HE2	HIS	239	-40.372	25.429	4.254	1.00	0.00
ATOM	2270	N	HIS	240	-40.698	21.169	10.817	1.00	40.57
ATOM	2271	CA	HIS	240	-41.071	20.772	12.165	1.00	43.12
ATOM	2272	C	HIS	240	-39.976	21.199	13.120	1.00	42.47
ATOM	2273	O	HIS	240	-40.231	21.476	14.289	1.00	42.87
ATOM	2274	CB	HIS	240	-41.245	19.257	12.259	1.00	48.45
ATOM	2275	CG	HIS	240	-42.552	18.765	11.727	1.00	54.77
ATOM	2276	ND1	HIS	240	-42.921	17.436	11.764	1.00	57.09
ATOM	2277	CD2	HIS	240	-43.589	19.427	11.159	1.00	57.17
ATOM	2278	CE1	HIS	240	-44.128	17.302	11.241	1.00	59.02
ATOM	2279	NE2	HIS	240	-44.554	18.495	10.866	1.00	59.61
ATOM	2280	H	HIS	240	-40.560	20.499	10.115	1.00	0.00
ATOM	2281	HD1	HIS	240	-42.372	16.697	12.103	1.00	0.00
ATOM	2282	HE2	HIS	240	-45.367	18.707	10.332	1.00	0.00
ATOM	2283	N	TYR	241	-38.757	21.261	12.600	1.00	41.62
ATOM	2284	CA	TYR	241	-37.598	21.621	13.394	1.00	39.89
ATOM	2285	C	TYR	241	-37.064	22.995	13.033	1.00	40.78
ATOM	2286	O	TYR	241	-36.720	23.785	13.912	1.00	41.42
ATOM	2287	CB	TYR	241	-36.518	20.556	13.209	1.00	37.39
ATOM	2288	CG	TYR	241	-37.006	19.162	13.548	1.00	35.05
ATOM	2289	CD1	TYR	241	-37.460	18.292	12.555	1.00	33.81
ATOM	2290	CD2	TYR	241	-37.043	18.725	14.870	1.00	34.80
ATOM	2291	CE1	TYR	241	-37.940	17.023	12.878	1.00	33.34
ATOM	2292	CE2	TYR	241	-37.518	17.463	15.204	1.00	33.45
ATOM	2293	CZ	TYR	241	-37.966	16.619	14.210	1.00	33.44
ATOM	2294	OH	TYR	241	-38.434	15.373	14.565	1.00	32.52
ATOM	2295	H	TYR	241	-38.620	21.061	11.652	1.00	0.00
ATOM	2296	HH	TYR	241	-38.322	15.249	15.506	1.00	0.00
ATOM	2297	N	VAL	242	-37.011	23.285	11.740	1.00	42.12
ATOM	2298	CA	VAL	242	-36.508	24.565	11.265	1.00	43.92
ATOM	2299	C	VAL	242	-37.606	25.618	11.126	1.00	46.59
ATOM	2300	O	VAL	242	-38.502	25.496	10.285	1.00	46.87
ATOM	2301	CB	VAL	242	-35.762	24.409	9.921	1.00	43.14
ATOM	2302	CG1	VAL	242	-35.229	25.750	9.454	1.00	42.99
ATOM	2303	CG2	VAL	242	-34.627	23.409	10.067	1.00	42.58
ATOM	2304	H	VAL	242	-37.315	22.619	11.101	1.00	0.00
ATOM	2305	N	PRO	243	-37.528	26.688	11.932	1.00	48.74
ATOM	2306	CA	PRO	243	-38.508	27.775	11.910	1.00	51.59
ATOM	2307	C	PRO	243	-38.460	28.613	10.637	1.00	54.17
ATOM	2308	O	PRO	243	-37.439	28.671	9.950	1.00	54.00
ATOM	2309	CB	PRO	243	-38.100	28.611	13.123	1.00	50.78
ATOM	2310	CG	PRO	243	-36.616	28.423	13.176	1.00	48.29
ATOM	2311	CD	PRO	243	-36.502	26.937	12.961	1.00	49.12

ATOM	2312	N	LYS	244	-39.571	29.275	10.344	1.00	58.19
ATOM	2313	CA	LYS	244	-39.673	30.146	9.179	1.00	63.13
ATOM	2314	C	LYS	244	-38.702	31.323	9.336	1.00	65.28
ATOM	2315	O	LYS	244	-38.832	32.130	10.271	1.00	65.32
ATOM	2316	CB	LYS	244	-41.104	30.685	9.058	1.00	65.63
ATOM	2317	CG	LYS	244	-41.311	31.701	7.932	1.00	68.20
ATOM	2318	CD	LYS	244	-42.362	32.763	8.288	1.00	69.17
ATOM	2319	CE	LYS	244	-41.848	33.732	9.354	1.00	70.12
ATOM	2320	NZ	LYS	244	-42.789	34.862	9.619	1.00	70.75
ATOM	2321	H	LYS	244	-40.346	29.153	10.929	1.00	0.00
ATOM	2322	HZ1	LYS	244	-43.698	34.486	9.956	1.00	0.00
ATOM	2323	HZ2	LYS	244	-42.930	35.415	8.753	1.00	0.00
ATOM	2324	HZ3	LYS	244	-42.389	35.478	10.355	1.00	0.00
ATOM	2325	N	LYS	245	-37.733	31.424	8.427	1.00	67.30
ATOM	2326	CA	LYS	245	-36.752	32.509	8.467	1.00	68.35
ATOM	2327	C	LYS	245	-35.876	32.535	7.213	1.00	68.88
ATOM	2328	O	LYS	245	-34.838	31.869	7.147	1.00	69.36
ATOM	2329	CB	LYS	245	-35.879	32.384	9.720	1.00	68.59
ATOM	2330	CG	LYS	245	-35.528	33.711	10.356	1.00	68.95
ATOM	2331	CD	LYS	245	-35.187	33.544	11.829	1.00	69.64
ATOM	2332	CE	LYS	245	-36.318	32.866	12.608	1.00	70.40
ATOM	2333	NZ	LYS	245	-37.664	33.481	12.387	1.00	70.71
ATOM	2334	H	LYS	245	-37.652	30.738	7.725	1.00	0.00
ATOM	2335	HZ1	LYS	245	-38.007	33.241	11.430	1.00	0.00
ATOM	2336	HZ2	LYS	245	-37.641	34.506	12.545	1.00	0.00
ATOM	2337	HZ3	LYS	245	-38.337	33.047	13.048	1.00	0.00
TER	2338		LYS	245					
ATOM	2339	N	ILE	16	8.303	15.213	9.545	1.00	19.59
ATOM	2340	CA	ILE	16	9.155	15.357	10.715	1.00	19.19
ATOM	2341	C	ILE	16	8.537	14.666	11.932	1.00	20.42
ATOM	2342	O	ILE	16	7.401	14.970	12.326	1.00	20.07
ATOM	2343	CB	ILE	16	9.384	16.846	11.047	1.00	18.18
ATOM	2344	CG1	ILE	16	10.152	17.536	9.918	1.00	18.36
ATOM	2345	CG2	ILE	16	10.108	16.991	12.368	1.00	18.50
ATOM	2346	H	ILE	16	8.210	14.319	9.140	1.00	0.00
ATOM	2347	CD	ILE	16	11.550	17.019	9.697	1.00	17.47
ATOM	2348	N	VAL	17	9.302	13.774	12.554	1.00	21.48
ATOM	2349	CA	VAL	17	8.836	13.046	13.731	1.00	23.27
ATOM	2350	C	VAL	17	9.225	13.768	15.021	1.00	26.50
ATOM	2351	O	VAL	17	10.405	14.017	15.259	1.00	27.82
ATOM	2352	CB	VAL	17	9.426	11.626	13.778	1.00	21.66
ATOM	2353	CG1	VAL	17	8.736	10.805	14.839	1.00	19.17
ATOM	2354	CG2	VAL	17	9.295	10.959	12.428	1.00	23.34
ATOM	2355	H	VAL	17	10.212	13.598	12.238	1.00	0.00
ATOM	2356	N	GLY	18	8.227	14.132	15.826	1.00	29.12
ATOM	2357	CA	GLY	18	8.473	14.797	17.099	1.00	31.95
ATOM	2358	C	GLY	18	8.800	16.288	17.155	1.00	34.68
ATOM	2359	O	GLY	18	9.573	16.719	18.021	1.00	37.51
ATOM	2360	H	GLY	18	7.319	13.915	15.553	1.00	0.00
ATOM	2361	N	GLY	19	8.195	17.089	16.283	1.00	33.55
ATOM	2362	CA	GLY	19	8.456	18.517	16.301	1.00	33.52
ATOM	2363	C	GLY	19	7.175	19.306	16.126	1.00	34.87
ATOM	2364	O	GLY	19	6.092	18.725	16.102	1.00	36.17
ATOM	2365	H	GLY	19	7.562	16.732	15.644	1.00	0.00
ATOM	2366	N	GLN	20	7.285	20.618	15.963	1.00	35.40
ATOM	2367	CA	GLN	20	6.107	21.452	15.790	1.00	37.00
ATOM	2368	C	GLN	20	6.213	22.229	14.483	1.00	36.62
ATOM	2369	O	GLN	20	7.212	22.116	13.777	1.00	36.42
ATOM	2370	CB	GLN	20	5.960	22.421	16.964	1.00	40.91
ATOM	2371	CG	GLN	20	4.533	22.941	17.143	1.00	46.95
ATOM	2372	CD	GLN	20	4.404	23.985	18.242	1.00	50.67
ATOM	2373	OE1	GLN	20	4.648	23.703	19.418	1.00	52.08
ATOM	2374	NE2	GLN	20	3.997	25.195	17.864	1.00	52.94

60/176

ATOM	2375	H	GLN	20	8.174	21.015	15.889	1.00	0.00
ATOM	2376	HE21	GLN	20	3.797	25.374	16.921	1.00	0.00
ATOM	2377	HE22	GLN	20	3.912	25.857	18.579	1.00	0.00
ATOM	2378	N	GLU	21	5.156	22.967	14.143	1.00	36.20
ATOM	2379	CA	GLU	21	5.117	23.778	12.930	1.00	34.76
ATOM	2380	C	GLU	21	6.181	24.844	13.017	1.00	33.43
ATOM	2381	O	GLU	21	6.479	25.352	14.097	1.00	33.62
ATOM	2382	CB	GLU	21	3.770	24.482	12.776	1.00	36.13
ATOM	2383	CG	GLU	21	2.566	23.585	12.582	1.00	39.32
ATOM	2384	CD	GLU	21	1.304	24.370	12.235	1.00	42.52
ATOM	2385	OE1	GLU	21	0.198	23.787	12.329	1.00	43.84
ATOM	2386	OE2	GLU	21	1.412	25.561	11.848	1.00	44.31
ATOM	2387	H	GLU	21	4.352	22.982	14.689	1.00	0.00
ATOM	2388	N	ALA	22	6.731	25.203	11.871	1.00	33.18
ATOM	2389	CA	ALA	22	7.760	26.217	11.810	1.00	33.19
ATOM	2390	C	ALA	22	7.104	27.572	11.605	1.00	33.14
ATOM	2391	O	ALA	22	6.086	27.675	10.914	1.00	34.49
ATOM	2392	CB	ALA	22	8.709	25.912	10.666	1.00	33.13
ATOM	2393	H	ALA	22	6.433	24.769	11.053	1.00	0.00
ATOM	2394	N	PRO	23	7.641	28.620	12.252	1.00	31.95
ATOM	2395	CA	PRO	23	7.136	29.992	12.154	1.00	31.88
ATOM	2396	C	PRO	23	7.145	30.464	10.702	1.00	32.61
ATOM	2397	O	PRO	23	8.053	30.127	9.948	1.00	31.97
ATOM	2398	CB	PRO	23	8.141	30.773	12.993	1.00	31.02
ATOM	2399	CG	PRO	23	8.459	29.809	14.073	1.00	31.22
ATOM	2400	CD	PRO	23	8.664	28.522	13.306	1.00	31.56
ATOM	2401	N	ARG	24	6.169	31.288	10.332	1.00	34.96
ATOM	2402	CA	ARG	24	6.048	31.790	8.963	1.00	38.03
ATOM	2403	C	ARG	24	7.332	32.231	8.252	1.00	38.00
ATOM	2404	O	ARG	24	7.347	32.357	7.026	1.00	39.29
ATOM	2405	CB	ARG	24	4.986	32.896	8.868	1.00	41.80
ATOM	2406	CG	ARG	24	3.587	32.419	8.426	1.00	44.91
ATOM	2407	CD	ARG	24	2.996	33.291	7.298	1.00	46.44
ATOM	2408	NE	ARG	24	3.260	32.772	5.948	1.00	48.09
ATOM	2409	CZ	ARG	24	4.350	33.027	5.216	1.00	49.11
ATOM	2410	NH1	ARG	24	5.318	33.805	5.687	1.00	48.98
ATOM	2411	NH2	ARG	24	4.473	32.500	4.001	1.00	49.73
ATOM	2412	H	ARG	24	5.501	31.539	11.003	1.00	0.00
ATOM	2413	HE	ARG	24	2.544	32.208	5.583	1.00	0.00
ATOM	2414	HH11	ARG	24	5.257	34.194	6.607	1.00	0.00
ATOM	2415	HH12	ARG	24	6.168	33.962	5.184	1.00	0.00
ATOM	2416	HH21	ARG	24	3.779	31.893	3.596	1.00	0.00
ATOM	2417	HH22	ARG	24	5.275	32.657	3.420	1.00	0.00
ATOM	2418	N	SER	25	8.394	32.491	9.000	1.00	36.70
ATOM	2419	CA	SER	25	9.646	32.887	8.377	1.00	38.07
ATOM	2420	C	SER	25	10.790	32.432	9.263	1.00	38.15
ATOM	2421	O	SER	25	11.407	33.231	9.966	1.00	38.72
ATOM	2422	CB	SER	25	9.690	34.400	8.147	1.00	39.38
ATOM	2423	OG	SER	25	9.557	35.122	9.359	1.00	42.21
ATOM	2424	H	SER	25	8.365	32.417	9.971	1.00	0.00
ATOM	2425	HG	SER	25	9.067	34.632	10.019	1.00	0.00
ATOM	2426	N	LYS	26	11.041	31.129	9.255	1.00	36.62
ATOM	2427	CA	LYS	26	12.094	30.564	10.076	1.00	35.06
ATOM	2428	C	LYS	26	13.086	29.766	9.245	1.00	34.73
ATOM	2429	O	LYS	26	14.243	29.594	9.637	1.00	37.77
ATOM	2430	CB	LYS	26	11.488	29.670	11.151	1.00	35.33
ATOM	2431	CG	LYS	26	12.383	29.447	12.349	1.00	36.52
ATOM	2432	CD	LYS	26	12.620	30.750	13.067	1.00	36.57
ATOM	2433	CE	LYS	26	13.340	30.536	14.372	1.00	38.26
ATOM	2434	NZ	LYS	26	13.409	31.823	15.116	1.00	40.27
ATOM	2435	H	LYS	26	10.477	30.563	8.705	1.00	0.00
ATOM	2436	HZ1	LYS	26	12.446	32.164	15.301	1.00	0.00
ATOM	2437	HZ2	LYS	26	13.917	32.514	14.527	1.00	0.00

61/1176

ATOM	2438	HZ3	LYS	26	13.919	31.686	16.012	1.00	0.00
ATOM	2439	N	TRP	27	12.642	29.272	8.099	1.00	30.07
ATOM	2440	CA	TRP	27	13.527	28.493	7.250	1.00	26.81
ATOM	2441	C	TRP	27	13.280	28.935	5.817	1.00	26.48
ATOM	2442	O	TRP	27	12.693	28.212	5.022	1.00	26.57
ATOM	2443	CB	TRP	27	13.235	27.001	7.430	1.00	24.02
ATOM	2444	CG	TRP	27	13.038	26.596	8.866	1.00	20.50
ATOM	2445	CD1	TRP	27	11.860	26.266	9.461	1.00	21.21
ATOM	2446	CD2	TRP	27	14.045	26.475	9.880	1.00	19.98
ATOM	2447	NE1	TRP	27	12.064	25.943	10.782	1.00	19.35
ATOM	2448	CE2	TRP	27	13.395	26.059	11.066	1.00	18.90
ATOM	2449	CE3	TRP	27	15.431	26.676	9.905	1.00	19.98
ATOM	2450	CZ2	TRP	27	14.081	25.837	12.260	1.00	17.99
ATOM	2451	CZ3	TRP	27	16.116	26.458	11.096	1.00	19.13
ATOM	2452	CH2	TRP	27	15.437	26.039	12.257	1.00	19.26
ATOM	2453	H	TRP	27	11.727	29.436	7.831	1.00	0.00
ATOM	2454	HE1	TRP	27	11.390	25.696	11.450	1.00	0.00
ATOM	2455	N	PRO	28	13.751	30.134	5.463	1.00	26.55
ATOM	2456	CA	PRO	28	13.587	30.706	4.123	1.00	26.76
ATOM	2457	C	PRO	28	14.279	29.954	3.000	1.00	26.36
ATOM	2458	O	PRO	28	14.131	30.321	1.837	1.00	27.58
ATOM	2459	CB	PRO	28	14.165	32.111	4.282	1.00	26.65
ATOM	2460	CG	PRO	28	15.250	31.902	5.278	1.00	27.42
ATOM	2461	CD	PRO	28	14.581	31.011	6.304	1.00	26.84
ATOM	2462	N	TRP	29	15.035	28.916	3.345	1.00	25.45
ATOM	2463	CA	TRP	29	15.750	28.129	2.341	1.00	25.13
ATOM	2464	C	TRP	29	15.098	26.789	1.994	1.00	24.78
ATOM	2465	O	TRP	29	15.530	26.120	1.049	1.00	25.95
ATOM	2466	CB	TRP	29	17.194	27.884	2.784	1.00	24.26
ATOM	2467	CG	TRP	29	17.310	27.230	4.132	1.00	22.84
ATOM	2468	CD1	TRP	29	17.081	25.915	4.435	1.00	22.16
ATOM	2469	CD2	TRP	29	17.669	27.869	5.360	1.00	22.18
ATOM	2470	NE1	TRP	29	17.270	25.701	5.776	1.00	22.28
ATOM	2471	CE2	TRP	29	17.632	26.882	6.370	1.00	22.66
ATOM	2472	CE3	TRP	29	18.021	29.182	5.706	1.00	20.83
ATOM	2473	CZ2	TRP	29	17.930	27.167	7.704	1.00	22.91
ATOM	2474	CZ3	TRP	29	18.317	29.467	7.030	1.00	20.78
ATOM	2475	CH2	TRP	29	18.269	28.462	8.014	1.00	23.06
ATOM	2476	H	TRP	29	15.119	28.665	4.279	1.00	0.00
ATOM	2477	HE1	TRP	29	17.126	24.846	6.245	1.00	0.00
ATOM	2478	N	GLN	30	14.087	26.395	2.770	1.00	22.56
ATOM	2479	CA	GLN	30	13.378	25.132	2.569	1.00	19.79
ATOM	2480	C	GLN	30	12.780	25.071	1.168	1.00	19.70
ATOM	2481	O	GLN	30	12.359	26.096	0.617	1.00	21.33
ATOM	2482	CB	GLN	30	12.277	24.981	3.621	1.00	18.14
ATOM	2483	CG	GLN	30	11.552	23.651	3.602	1.00	16.12
ATOM	2484	CD	GLN	30	12.447	22.491	3.952	1.00	14.29
ATOM	2485	OE1	GLN	30	12.496	21.497	3.231	1.00	15.76
ATOM	2486	NE2	GLN	30	13.159	22.604	5.063	1.00	11.06
ATOM	2487	H	GLN	30	13.745	26.996	3.457	1.00	0.00
ATOM	2488	HE21	GLN	30	13.100	23.413	5.605	1.00	0.00
ATOM	2489	HE22	GLN	30	13.720	21.832	5.270	1.00	0.00
ATOM	2490	N	VAL	31	12.759	23.876	0.592	1.00	18.32
ATOM	2491	CA	VAL	31	12.228	23.678	-0.750	1.00	17.12
ATOM	2492	C	VAL	31	11.439	22.375	-0.845	1.00	16.16
ATOM	2493	O	VAL	31	11.690	21.430	-0.092	1.00	16.44
ATOM	2494	CB	VAL	31	13.375	23.690	-1.799	1.00	16.99
ATOM	2495	CG1	VAL	31	12.932	23.065	-3.107	1.00	17.45
ATOM	2496	CG2	VAL	31	13.832	25.119	-2.052	1.00	18.64
ATOM	2497	H	VAL	31	13.122	23.086	1.052	1.00	0.00
ATOM	2498	N	SER	32	10.445	22.367	-1.728	1.00	14.09
ATOM	2499	CA	SER	32	9.609	21.205	-1.971	1.00	13.42
ATOM	2500	C	SER	32	9.792	20.816	-3.428	1.00	13.80

ATOM	2501	O	SER	32	9.605	21.649	-4.313	1.00	15.20
ATOM	2502	CB	SER	32	8.141	21.544	-1.716	1.00	13.19
ATOM	2503	OG	SER	32	7.288	20.484	-2.125	1.00	12.32
ATOM	2504	H	SER	32	10.255	23.191	-2.219	1.00	0.00
ATOM	2505	HG	SER	32	6.372	20.719	-1.909	1.00	0.00
ATOM	2506	N	LEU	33	10.233	19.585	-3.667	1.00	13.20
ATOM	2507	CA	LEU	33	10.428	19.085	-5.020	1.00	13.21
ATOM	2508	C	LEU	33	9.149	18.369	-5.394	1.00	15.47
ATOM	2509	O	LEU	33	8.661	17.535	-4.622	1.00	16.81
ATOM	2510	CB	LEU	33	11.604	18.111	-5.085	1.00	12.12
ATOM	2511	CG	LEU	33	13.004	18.616	-4.739	1.00	11.95
ATOM	2512	CD1	LEU	33	14.048	17.626	-5.256	1.00	10.82
ATOM	2513	CD2	LEU	33	13.227	19.984	-5.353	1.00	11.27
ATOM	2514	H	LEU	33	10.429	19.005	-2.915	1.00	0.00
ATOM	2515	N	ARG	34	8.618	18.671	-6.575	1.00	16.91
ATOM	2516	CA	ARG	34	7.370	18.069	-7.031	1.00	19.06
ATOM	2517	C	ARG	34	7.516	17.201	-8.280	1.00	21.65
ATOM	2518	O	ARG	34	8.478	17.342	-9.036	1.00	23.43
ATOM	2519	CB	ARG	34	6.354	19.167	-7.340	1.00	17.58
ATOM	2520	CG	ARG	34	6.261	20.267	-6.318	1.00	16.22
ATOM	2521	CD	ARG	34	5.594	19.814	-5.036	1.00	16.92
ATOM	2522	NE	ARG	34	5.360	20.971	-4.173	1.00	18.23
ATOM	2523	CZ	ARG	34	4.220	21.660	-4.115	1.00	17.31
ATOM	2524	NH1	ARG	34	3.171	21.309	-4.854	1.00	16.04
ATOM	2525	NH2	ARG	34	4.132	22.717	-3.315	1.00	18.61
ATOM	2526	H	ARG	34	9.083	19.302	-7.162	1.00	0.00
ATOM	2527	HE	ARG	34	6.127	21.197	-3.616	1.00	0.00
ATOM	2528	HH11	ARG	34	3.136	20.499	-5.443	1.00	0.00
ATOM	2529	HH12	ARG	34	2.344	21.904	-4.839	1.00	0.00
ATOM	2530	HH21	ARG	34	4.824	23.118	-2.714	1.00	0.00
ATOM	2531	HH22	ARG	34	3.269	23.270	-3.296	1.00	0.00
ATOM	2532	N	VAL	35	6.544	16.311	-8.485	1.00	23.39
ATOM	2533	CA	VAL	35	6.487	15.439	-9.656	1.00	25.24
ATOM	2534	C	VAL	35	5.079	15.486	-10.208	1.00	29.75
ATOM	2535	O	VAL	35	4.102	15.568	-9.451	1.00	29.19
ATOM	2536	CB	VAL	35	6.809	13.970	-9.354	1.00	22.92
ATOM	2537	CG1	VAL	35	8.289	13.756	-9.358	1.00	24.74
ATOM	2538	CG2	VAL	35	6.200	13.546	-8.039	1.00	22.83
ATOM	2539	H	VAL	35	5.841	16.248	-7.804	1.00	0.00
ATOM	2540	N	HIS	36	4.992	15.403	-11.532	1.00	34.90
ATOM	2541	CA	HIS	36	3.728	15.445	-12.251	1.00	39.85
ATOM	2542	C	HIS	36	2.504	14.880	-11.533	1.00	40.09
ATOM	2543	O	HIS	36	1.666	15.649	-11.079	1.00	42.12
ATOM	2544	CB	HIS	36	3.873	14.865	-13.670	1.00	48.03
ATOM	2545	CG	HIS	36	4.247	13.407	-13.722	1.00	56.59
ATOM	2546	ND1	HIS	36	5.437	12.911	-13.226	1.00	59.53
ATOM	2547	CD2	HIS	36	3.598	12.344	-14.263	1.00	59.06
ATOM	2548	CE1	HIS	36	5.505	11.611	-13.459	1.00	60.32
ATOM	2549	NE2	HIS	36	4.403	11.243	-14.088	1.00	60.67
ATOM	2550	H	HIS	36	5.840	15.437	-12.013	1.00	0.00
ATOM	2551	HD1	HIS	36	6.202	13.362	-12.790	1.00	0.00
ATOM	2552	HE2	HIS	36	4.194	10.338	-14.407	1.00	0.00
ATOM	2553	N	GLY	37	2.403	13.559	-11.408	1.00	38.78
ATOM	2554	CA	GLY	37	1.248	12.964	-10.743	1.00	38.47
ATOM	2555	C	GLY	37	-0.096	13.228	-11.422	1.00	36.88
ATOM	2556	O	GLY	37	-0.129	13.644	-12.580	1.00	37.63
ATOM	2557	H	GLY	37	3.105	12.971	-11.713	1.00	0.00
ATOM	2558	N	PRO	37A	-1.226	12.954	-10.740	1.00	35.09
ATOM	2559	CA	PRO	37A	-2.480	13.700	-10.906	1.00	33.69
ATOM	2560	C	PRO	37A	-2.324	15.161	-10.497	1.00	32.82
ATOM	2561	O	PRO	37A	-3.130	16.012	-10.865	1.00	32.88
ATOM	2562	CB	PRO	37A	-3.433	12.973	-9.962	1.00	33.08
ATOM	2563	CG	PRO	37A	-2.909	11.584	-9.955	1.00	33.35

63/126

ATOM	2564	CD	PRO	37A	-1.429	11.804	-9.845	1.00	34.14
ATOM	2565	N	TYR	37B	-1.309	15.429	-9.686	1.00	31.45
ATOM	2566	CA	TYR	37B	-1.022	16.776	-9.225	1.00	30.81
ATOM	2567	C	TYR	37B	0.453	16.838	-8.859	1.00	31.27
ATOM	2568	O	TYR	37B	1.084	15.809	-8.581	1.00	32.71
ATOM	2569	CB	TYR	37B	-1.881	17.142	-8.011	1.00	28.47
ATOM	2570	CG	TYR	37B	-1.623	16.309	-6.772	1.00	28.52
ATOM	2571	CD1	TYR	37B	-0.927	16.835	-5.685	1.00	28.66
ATOM	2572	CD2	TYR	37B	-2.107	15.008	-6.670	1.00	29.80
ATOM	2573	CE1	TYR	37B	-0.726	16.082	-4.527	1.00	28.84
ATOM	2574	CE2	TYR	37B	-1.912	14.249	-5.513	1.00	29.05
ATOM	2575	CZ	TYR	37B	-1.225	14.793	-4.450	1.00	28.75
ATOM	2576	OH	TYR	37B	-1.064	14.054	-3.299	1.00	30.25
ATOM	2577	H	TYR	37B	-0.674	14.741	-9.401	1.00	0.00
ATOM	2578	HH	TYR	37B	-0.442	14.569	-2.765	1.00	0.00
ATOM	2579	N	TRP	38	1.002	18.045	-8.875	1.00	29.57
ATOM	2580	CA	TRP	38	2.395	18.258	-8.535	1.00	27.83
ATOM	2581	C	TRP	38	2.636	17.823	-7.102	1.00	27.67
ATOM	2582	O	TRP	38	2.667	18.633	-6.172	1.00	27.98
ATOM	2583	CB	TRP	38	2.738	19.719	-8.756	1.00	27.58
ATOM	2584	CG	TRP	38	2.673	20.045	-10.193	1.00	27.51
ATOM	2585	CD1	TRP	38	1.665	20.691	-10.844	1.00	26.98
ATOM	2586	CD2	TRP	38	3.627	19.665	-11.194	1.00	27.86
ATOM	2587	NE1	TRP	38	1.927	20.728	-12.192	1.00	27.54
ATOM	2588	CE2	TRP	38	3.128	20.109	-12.434	1.00	27.71
ATOM	2589	CE3	TRP	38	4.858	18.990	-11.161	1.00	27.01
ATOM	2590	CZ2	TRP	38	3.817	19.899	-13.638	1.00	27.95
ATOM	2591	CZ3	TRP	38	5.539	18.784	-12.357	1.00	27.43
ATOM	2592	CH2	TRP	38	5.016	19.238	-13.579	1.00	27.02
ATOM	2593	H	TRP	38	0.448	18.808	-9.123	1.00	0.00
ATOM	2594	HE1	TRP	38	1.328	21.111	-12.868	1.00	0.00
ATOM	2595	N	MET	39	2.836	16.525	-6.955	1.00	27.45
ATOM	2596	CA	MET	39	3.039	15.888	-5.674	1.00	28.88
ATOM	2597	C	MET	39	4.417	16.177	-5.078	1.00	28.83
ATOM	2598	O	MET	39	5.414	16.207	-5.802	1.00	30.54
ATOM	2599	CB	MET	39	2.873	14.391	-5.886	1.00	31.85
ATOM	2600	CG	MET	39	2.399	13.616	-4.692	1.00	34.61
ATOM	2601	SD	MET	39	2.224	11.903	-5.183	1.00	37.58
ATOM	2602	CE	MET	39	1.325	12.088	-6.775	1.00	35.07
ATOM	2603	H	MET	39	2.895	15.993	-7.783	1.00	0.00
ATOM	2604	N	HIS	40	4.465	16.430	-3.770	1.00	25.91
ATOM	2605	CA	HIS	40	5.732	16.680	-3.077	1.00	23.53
ATOM	2606	C	HIS	40	6.411	15.335	-2.854	1.00	22.49
ATOM	2607	O	HIS	40	5.818	14.460	-2.223	1.00	24.35
ATOM	2608	CB	HIS	40	5.482	17.342	-1.709	1.00	21.80
ATOM	2609	CG	HIS	40	6.626	17.214	-0.743	1.00	19.85
ATOM	2610	ND1	HIS	40	7.636	18.144	-0.655	1.00	19.82
ATOM	2611	CD2	HIS	40	6.925	16.252	0.165	1.00	19.92
ATOM	2612	CE1	HIS	40	8.511	17.765	0.259	1.00	19.50
ATOM	2613	NE2	HIS	40	8.104	16.618	0.771	1.00	19.97
ATOM	2614	H	HIS	40	3.627	16.493	-3.265	1.00	0.00
ATOM	2615	HD1	HIS	40	7.692	18.959	-1.198	1.00	0.00
ATOM	2616	HE2	HIS	40	8.620	16.094	1.430	1.00	0.00
ATOM	2617	N	PHE	41	7.641	15.163	-3.335	1.00	19.65
ATOM	2618	CA	PHE	41	8.345	13.896	-3.122	1.00	17.53
ATOM	2619	C	PHE	41	9.585	14.014	-2.227	1.00	16.64
ATOM	2620	O	PHE	41	10.013	13.045	-1.599	1.00	15.87
ATOM	2621	CB	PHE	41	8.672	13.190	-4.461	1.00	16.21
ATOM	2622	CG	PHE	41	9.729	13.875	-5.302	1.00	15.02
ATOM	2623	CD1	PHE	41	11.068	13.529	-5.179	1.00	13.68
ATOM	2624	CD2	PHE	41	9.382	14.833	-6.243	1.00	15.50
ATOM	2625	CE1	PHE	41	12.040	14.125	-5.977	1.00	13.28
ATOM	2626	CE2	PHE	41	10.357	15.432	-7.047	1.00	15.21

ATOM	2627	CZ	PHE	41	11.686	15.075	-6.910	1.00	13.41
ATOM	2628	H	PHE	41	8.037	15.900	-3.847	1.00	0.00
ATOM	2629	N	CYS	42	10.108	15.226	-2.106	1.00	16.41
ATOM	2630	CA	CYS	42	11.295	15.468	-1.305	1.00	15.51
ATOM	2631	C	CYS	42	11.450	16.939	-0.995	1.00	16.13
ATOM	2632	O	CYS	42	10.766	17.782	-1.577	1.00	17.43
ATOM	2633	CB	CYS	42	12.527	15.022	-2.072	1.00	13.97
ATOM	2634	SG	CYS	42	12.861	13.250	-1.978	1.00	13.42
ATOM	2635	H	CYS	42	9.721	15.976	-2.597	1.00	0.00
ATOM	2636	N	GLY	43	12.358	17.239	-0.080	1.00	15.27
ATOM	2637	CA	GLY	43	12.609	18.612	0.290	1.00	15.57
ATOM	2638	C	GLY	43	13.929	18.982	-0.330	1.00	17.30
ATOM	2639	O	GLY	43	14.477	18.211	-1.122	1.00	19.14
ATOM	2640	H	GLY	43	12.929	16.526	0.285	1.00	0.00
ATOM	2641	N	GLY	44	14.447	20.146	0.040	1.00	17.05
ATOM	2642	CA	GLY	44	15.721	20.605	-0.485	1.00	17.02
ATOM	2643	C	GLY	44	16.006	21.969	0.100	1.00	17.99
ATOM	2644	O	GLY	44	15.235	22.446	0.935	1.00	19.89
ATOM	2645	H	GLY	44	13.969	20.713	0.677	1.00	0.00
ATOM	2646	N	SER	45	17.105	22.594	-0.297	1.00	17.11
ATOM	2647	CA	SER	45	17.423	23.918	0.213	1.00	17.01
ATOM	2648	C	SER	45	18.030	24.784	-0.866	1.00	17.61
ATOM	2649	O	SER	45	18.636	24.278	-1.814	1.00	19.51
ATOM	2650	CB	SER	45	18.381	23.823	1.391	1.00	17.98
ATOM	2651	OG	SER	45	19.564	23.162	1.003	1.00	21.12
ATOM	2652	H	SER	45	17.735	22.124	-0.887	1.00	0.00
ATOM	2653	HG	SER	45	20.281	23.346	1.622	1.00	0.00
ATOM	2654	N	LEU	46	17.826	26.087	-0.739	1.00	17.02
ATOM	2655	CA	LEU	46	18.359	27.052	-1.689	1.00	17.24
ATOM	2656	C	LEU	46	19.774	27.389	-1.223	1.00	19.59
ATOM	2657	O	LEU	46	19.949	28.114	-0.245	1.00	21.65
ATOM	2658	CB	LEU	46	17.490	28.302	-1.658	1.00	14.31
ATOM	2659	CG	LEU	46	17.444	29.197	-2.882	1.00	10.66
ATOM	2660	CD1	LEU	46	16.885	28.416	-4.041	1.00	8.44
ATOM	2661	CD2	LEU	46	16.562	30.389	-2.572	1.00	9.92
ATOM	2662	H	LEU	46	17.269	26.385	0.007	1.00	0.00
ATOM	2663	N	ILE	47	20.789	26.839	-1.882	1.00	20.63
ATOM	2664	CA	ILE	47	22.166	27.108	-1.475	1.00	21.59
ATOM	2665	C	ILE	47	22.809	28.261	-2.243	1.00	26.00
ATOM	2666	O	ILE	47	23.941	28.657	-1.956	1.00	28.12
ATOM	2667	CB	ILE	47	23.040	25.860	-1.609	1.00	18.83
ATOM	2668	CG1	ILE	47	23.199	25.474	-3.082	1.00	17.78
ATOM	2669	CG2	ILE	47	22.426	24.729	-0.812	1.00	19.00
ATOM	2670	H	ILE	47	20.574	26.259	-2.650	1.00	0.00
ATOM	2671	CD	ILE	47	24.117	24.279	-3.329	1.00	15.97
ATOM	2672	N	HIS	48	22.063	28.812	-3.197	1.00	28.50
ATOM	2673	CA	HIS	48	22.507	29.919	-4.048	1.00	29.64
ATOM	2674	C	HIS	48	21.244	30.318	-4.802	1.00	30.24
ATOM	2675	O	HIS	48	20.396	29.470	-5.071	1.00	30.81
ATOM	2676	CB	HIS	48	23.581	29.422	-5.026	1.00	31.70
ATOM	2677	CG	HIS	48	24.036	30.448	-6.018	1.00	33.16
ATOM	2678	ND1	HIS	48	25.240	31.110	-5.904	1.00	34.00
ATOM	2679	CD2	HIS	48	23.466	30.901	-7.161	1.00	32.66
ATOM	2680	CE1	HIS	48	25.392	31.925	-6.932	1.00	35.23
ATOM	2681	NE2	HIS	48	24.330	31.816	-7.710	1.00	33.30
ATOM	2682	H	HIS	48	21.159	28.462	-3.362	1.00	0.00
ATOM	2683	HD1	HIS	48	25.904	30.997	-5.169	1.00	0.00
ATOM	2684	HE2	HIS	48	24.209	32.306	-8.554	1.00	0.00
ATOM	2685	N	PRO	49	21.104	31.598	-5.173	1.00	30.34
ATOM	2686	CA	PRO	49	19.912	32.056	-5.897	1.00	30.07
ATOM	2687	C	PRO	49	19.492	31.326	-7.187	1.00	29.56
ATOM	2688	O	PRO	49	18.592	31.792	-7.875	1.00	31.26
ATOM	2689	CB	PRO	49	20.233	33.525	-6.166	1.00	29.78

65/126

ATOM	2690	CG	PRO	49	21.000	33.915	-4.954	1.00	29.91
ATOM	2691	CD	PRO	49	21.950	32.747	-4.800	1.00	31.01
ATOM	2692	N	GLN	50	20.099	30.188	-7.511	1.00	27.66
ATOM	2693	CA	GLN	50	19.724	29.481	-8.733	1.00	26.78
ATOM	2694	C	GLN	50	20.006	27.979	-8.707	1.00	25.56
ATOM	2695	O	GLN	50	19.869	27.288	-9.719	1.00	26.68
ATOM	2696	CB	GLN	50	20.415	30.118	-9.934	1.00	28.29
ATOM	2697	CG	GLN	50	19.857	29.663	-11.266	1.00	31.10
ATOM	2698	CD	GLN	50	20.549	30.314	-12.434	1.00	32.60
ATOM	2699	OE1	GLN	50	21.479	31.106	-12.258	1.00	34.73
ATOM	2700	NE2	GLN	50	20.107	29.981	-13.640	1.00	32.63
ATOM	2701	H	GLN	50	20.762	29.768	-6.949	1.00	0.00
ATOM	2702	HE21	GLN	50	19.396	29.305	-13.699	1.00	0.00
ATOM	2703	HE22	GLN	50	20.518	30.403	-14.419	1.00	0.00
ATOM	2704	N	TRP	51	20.360	27.467	-7.540	1.00	22.55
ATOM	2705	CA	TRP	51	20.645	26.055	-7.403	1.00	20.61
ATOM	2706	C	TRP	51	19.932	25.533	-6.187	1.00	20.60
ATOM	2707	O	TRP	51	19.655	26.275	-5.249	1.00	21.95
ATOM	2708	CB	TRP	51	22.135	25.831	-7.225	1.00	20.58
ATOM	2709	CG	TRP	51	22.913	26.065	-8.442	1.00	21.12
ATOM	2710	CD1	TRP	51	23.459	27.243	-8.853	1.00	20.74
ATOM	2711	CD2	TRP	51	23.261	25.091	-9.426	1.00	21.74
ATOM	2712	NE1	TRP	51	24.132	27.062	-10.037	1.00	22.47
ATOM	2713	CE2	TRP	51	24.026	25.748	-10.411	1.00	21.72
ATOM	2714	CE3	TRP	51	23.000	23.723	-9.569	1.00	22.40
ATOM	2715	CZ2	TRP	51	24.538	25.087	-11.530	1.00	22.08
ATOM	2716	CZ3	TRP	51	23.511	23.061	-10.684	1.00	23.51
ATOM	2717	CH2	TRP	51	24.271	23.747	-11.650	1.00	22.85
ATOM	2718	H	TRP	51	20.359	28.006	-6.724	1.00	0.00
ATOM	2719	HE1	TRP	51	24.588	27.744	-10.577	1.00	0.00
ATOM	2720	N	VAL	52	19.642	24.246	-6.194	1.00	20.29
ATOM	2721	CA	VAL	52	18.977	23.631	-5.070	1.00	20.05
ATOM	2722	C	VAL	52	19.770	22.384	-4.722	1.00	19.26
ATOM	2723	O	VAL	52	20.294	21.699	-5.608	1.00	18.68
ATOM	2724	CB	VAL	52	17.521	23.267	-5.415	1.00	21.89
ATOM	2725	CG1	VAL	52	16.800	22.733	-4.185	1.00	23.63
ATOM	2726	CG2	VAL	52	16.792	24.488	-5.957	1.00	22.79
ATOM	2727	H	VAL	52	19.849	23.708	-6.986	1.00	0.00
ATOM	2728	N	LEU	53	19.927	22.151	-3.426	1.00	18.21
ATOM	2729	CA	LEU	53	20.655	20.995	-2.931	1.00	17.23
ATOM	2730	C	LEU	53	19.628	19.984	-2.434	1.00	17.42
ATOM	2731	O	LEU	53	18.676	20.343	-1.735	1.00	17.68
ATOM	2732	CB	LEU	53	21.604	21.423	-1.807	1.00	15.02
ATOM	2733	CG	LEU	53	22.556	20.410	-1.177	1.00	12.62
ATOM	2734	CD1	LEU	53	23.370	19.700	-2.234	1.00	12.84
ATOM	2735	CD2	LEU	53	23.459	21.137	-0.210	1.00	12.00
ATOM	2736	H	LEU	53	19.536	22.787	-2.792	1.00	0.00
ATOM	2737	N	THR	54	19.802	18.732	-2.827	1.00	17.53
ATOM	2738	CA	THR	54	18.878	17.684	-2.436	1.00	19.37
ATOM	2739	C	THR	54	19.627	16.368	-2.412	1.00	20.64
ATOM	2740	O	THR	54	20.732	16.270	-2.949	1.00	22.18
ATOM	2741	CB	THR	54	17.708	17.573	-3.444	1.00	19.81
ATOM	2742	OG1	THR	54	16.767	16.593	-2.990	1.00	20.34
ATOM	2743	CG2	THR	54	18.222	17.172	-4.823	1.00	18.84
ATOM	2744	H	THR	54	20.562	18.501	-3.407	1.00	0.00
ATOM	2745	HG1	THR	54	17.052	15.713	-3.244	1.00	0.00
ATOM	2746	N	ALA	55	19.032	15.369	-1.766	1.00	20.18
ATOM	2747	CA	ALA	55	19.622	14.040	-1.678	1.00	19.11
ATOM	2748	C	ALA	55	19.480	13.435	-3.067	1.00	19.11
ATOM	2749	O	ALA	55	18.418	13.518	-3.684	1.00	19.41
ATOM	2750	CB	ALA	55	18.881	13.191	-0.645	1.00	17.89
ATOM	2751	H	ALA	55	18.154	15.567	-1.391	1.00	0.00
ATOM	2752	N	ALA	56	20.555	12.841	-3.563	1.00	18.83

66/176

ATOM	2753	CA	ALA	56	20.552	12.249	-4.886	1.00	17.36
ATOM	2754	C	ALA	56	19.450	11.221	-5.051	1.00	17.46
ATOM	2755	O	ALA	56	18.778	11.198	-6.076	1.00	18.33
ATOM	2756	CB	ALA	56	21.892	11.624	-5.179	1.00	16.53
ATOM	2757	H	ALA	56	21.351	12.744	-2.995	1.00	0.00
ATOM	2758	N	HIS	57	19.200	10.424	-4.019	1.00	17.19
ATOM	2759	CA	HIS	57	18.180	9.388	-4.135	1.00	17.54
ATOM	2760	C	HIS	57	16.794	9.884	-4.509	1.00	17.73
ATOM	2761	O	HIS	57	15.974	9.104	-5.003	1.00	19.07
ATOM	2762	CB	HIS	57	18.140	8.458	-2.912	1.00	15.19
ATOM	2763	CG	HIS	57	17.451	9.028	-1.716	1.00	13.02
ATOM	2764	ND1	HIS	57	18.109	9.781	-0.770	1.00	14.48
ATOM	2765	CD2	HIS	57	16.182	8.885	-1.266	1.00	12.46
ATOM	2766	CE1	HIS	57	17.280	10.071	0.217	1.00	14.99
ATOM	2767	NE2	HIS	57	16.104	9.540	-0.060	1.00	13.56
ATOM	2768	H	HIS	57	19.735	10.539	-3.222	1.00	0.00
ATOM	2769	HD1	HIS	57	19.029	10.101	-0.797	1.00	0.00
ATOM	2770	HE2	HIS	57	15.364	9.660	0.589	1.00	0.00
ATOM	2771	N	CYS	58	16.557	11.183	-4.325	1.00	15.90
ATOM	2772	CA	CYS	58	15.270	11.781	-4.664	1.00	13.65
ATOM	2773	C	CYS	58	15.140	11.922	-6.171	1.00	13.01
ATOM	2774	O	CYS	58	14.041	11.869	-6.716	1.00	12.43
ATOM	2775	CB	CYS	58	15.115	13.157	-4.011	1.00	11.81
ATOM	2776	SG	CYS	58	14.878	13.143	-2.206	1.00	12.16
ATOM	2777	H	CYS	58	17.254	11.786	-4.000	1.00	0.00
ATOM	2778	N	VAL	59	16.269	12.060	-6.850	1.00	13.50
ATOM	2779	CA	VAL	59	16.254	12.235	-8.287	1.00	15.24
ATOM	2780	C	VAL	59	17.119	11.230	-9.051	1.00	16.81
ATOM	2781	O	VAL	59	17.322	11.381	-10.255	1.00	17.91
ATOM	2782	CB	VAL	59	16.652	13.692	-8.653	1.00	15.93
ATOM	2783	CG1	VAL	59	15.678	14.675	-8.019	1.00	15.10
ATOM	2784	CG2	VAL	59	18.055	14.000	-8.162	1.00	16.07
ATOM	2785	H	VAL	59	17.135	12.040	-6.403	1.00	0.00
ATOM	2786	N	GLY	60	17.565	10.171	-8.377	1.00	18.29
ATOM	2787	CA	GLY	60	18.400	9.171	-9.027	1.00	19.78
ATOM	2788	C	GLY	60	18.211	7.780	-8.448	1.00	21.73
ATOM	2789	O	GLY	60	17.307	7.587	-7.633	1.00	22.76
ATOM	2790	H	GLY	60	17.367	10.069	-7.421	1.00	0.00
ATOM	2791	N	PRO	60A	19.035	6.786	-8.836	1.00	22.38
ATOM	2792	CA	PRO	60A	20.102	6.848	-9.840	1.00	23.99
ATOM	2793	C	PRO	60A	19.603	6.798	-11.284	1.00	26.78
ATOM	2794	O	PRO	60A	20.330	7.160	-12.211	1.00	26.72
ATOM	2795	CB	PRO	60A	20.949	5.627	-9.499	1.00	22.26
ATOM	2796	CG	PRO	60A	19.927	4.652	-9.071	1.00	21.97
ATOM	2797	CD	PRO	60A	19.061	5.483	-8.153	1.00	21.93
ATOM	2798	N	ASP	60B	18.385	6.312	-11.483	1.00	29.92
ATOM	2799	CA	ASP	60B	17.815	6.248	-12.821	1.00	32.24
ATOM	2800	C	ASP	60B	17.413	7.643	-13.261	1.00	32.61
ATOM	2801	O	ASP	60B	16.755	8.369	-12.508	1.00	33.74
ATOM	2802	CB	ASP	60B	16.625	5.295	-12.852	1.00	35.70
ATOM	2803	CG	ASP	60B	17.052	3.843	-13.013	1.00	39.63
ATOM	2804	OD1	ASP	60B	16.328	3.088	-13.698	1.00	42.71
ATOM	2805	OD2	ASP	60B	18.124	3.463	-12.486	1.00	39.48
ATOM	2806	H	ASP	60B	17.877	5.898	-10.759	1.00	0.00
ATOM	2807	N	VAL	60C	17.825	8.010	-14.471	1.00	32.19
ATOM	2808	CA	VAL	60C	17.566	9.328	-15.042	1.00	31.81
ATOM	2809	C	VAL	60C	16.098	9.726	-15.061	1.00	32.78
ATOM	2810	O	VAL	60C	15.241	8.972	-15.521	1.00	31.88
ATOM	2811	CB	VAL	60C	18.128	9.439	-16.465	1.00	30.90
ATOM	2812	CG1	VAL	60C	17.951	10.853	-16.988	1.00	31.50
ATOM	2813	CG2	VAL	60C	19.585	9.053	-16.480	1.00	30.47
ATOM	2814	H	VAL	60C	18.260	7.321	-14.992	1.00	0.00
ATOM	2815	N	LYS	60D	15.827	10.931	-14.571	1.00	34.63

69/126

ATOM	2816	CA	LYS	60D	14.473	11.471	-14.516	1.00	36.61
ATOM	2817	C	LYS	60D	14.276	12.493	-15.639	1.00	37.86
ATOM	2818	O	LYS	60D	15.255	12.944	-16.248	1.00	38.80
ATOM	2819	CB	LYS	60D	14.231	12.134	-13.156	1.00	37.46
ATOM	2820	CG	LYS	60D	14.432	11.209	-11.958	1.00	39.46
ATOM	2821	CD	LYS	60D	13.524	9.976	-12.021	1.00	41.12
ATOM	2822	CE	LYS	60D	13.587	9.147	-10.743	1.00	41.39
ATOM	2823	NZ	LYS	60D	14.981	8.765	-10.396	1.00	42.83
ATOM	2824	H	LYS	60D	16.579	11.494	-14.309	1.00	0.00
ATOM	2825	HZ1	LYS	60D	15.530	9.628	-10.211	1.00	0.00
ATOM	2826	HZ2	LYS	60D	15.444	8.311	-11.221	1.00	0.00
ATOM	2827	HZ3	LYS	60D	15.003	8.161	-9.553	1.00	0.00
ATOM	2828	N	ASP	60E	13.018	12.835	-15.927	1.00	37.69
ATOM	2829	CA	ASP	60E	12.687	13.813	-16.971	1.00	36.59
ATOM	2830	C	ASP	60E	12.401	15.168	-16.319	1.00	34.20
ATOM	2831	O	ASP	60E	11.424	15.321	-15.585	1.00	35.05
ATOM	2832	CB	ASP	60E	11.468	13.344	-17.780	1.00	39.68
ATOM	2833	CG	ASP	60E	11.082	14.316	-18.901	1.00	42.67
ATOM	2834	OD1	ASP	60E	11.798	15.318	-19.148	1.00	43.63
ATOM	2835	OD2	ASP	60E	10.042	14.073	-19.551	1.00	44.07
ATOM	2836	H	ASP	60E	12.267	12.460	-15.423	1.00	0.00
ATOM	2837	N	LEU	61	13.233	16.157	-16.628	1.00	30.70
ATOM	2838	CA	LEU	61	13.104	17.495	-16.058	1.00	28.24
ATOM	2839	C	LEU	61	11.737	18.127	-16.259	1.00	27.08
ATOM	2840	O	LEU	61	11.274	18.901	-15.415	1.00	26.94
ATOM	2841	CB	LEU	61	14.184	18.420	-16.614	1.00	28.43
ATOM	2842	CG	LEU	61	15.621	18.307	-16.103	1.00	27.91
ATOM	2843	CD1	LEU	61	16.104	16.877	-16.139	1.00	28.27
ATOM	2844	CD2	LEU	61	16.511	19.182	-16.968	1.00	29.59
ATOM	2845	H	LEU	61	13.920	15.959	-17.295	1.00	0.00
ATOM	2846	N	ALA	62	11.082	17.784	-17.364	1.00	26.52
ATOM	2847	CA	ALA	62	9.757	18.320	-17.664	1.00	25.24
ATOM	2848	C	ALA	62	8.742	17.859	-16.616	1.00	24.34
ATOM	2849	O	ALA	62	7.679	18.462	-16.459	1.00	24.36
ATOM	2850	CB	ALA	62	9.313	17.884	-19.056	1.00	23.95
ATOM	2851	H	ALA	62	11.490	17.124	-17.969	1.00	0.00
ATOM	2852	N	ALA	63	9.076	16.779	-15.917	1.00	23.30
ATOM	2853	CA	ALA	63	8.213	16.212	-14.891	1.00	23.20
ATOM	2854	C	ALA	63	8.484	16.808	-13.514	1.00	22.80
ATOM	2855	O	ALA	63	7.712	16.593	-12.577	1.00	22.80
ATOM	2856	CB	ALA	63	8.386	14.698	-14.851	1.00	22.57
ATOM	2857	H	ALA	63	9.919	16.312	-16.072	1.00	0.00
ATOM	2858	N	LEU	64	9.569	17.565	-13.403	1.00	22.39
ATOM	2859	CA	LEU	64	9.953	18.176	-12.143	1.00	23.25
ATOM	2860	C	LEU	64	9.691	19.673	-12.040	1.00	23.93
ATOM	2861	O	LEU	64	9.748	20.421	-13.029	1.00	24.43
ATOM	2862	CB	LEU	64	11.432	17.929	-11.854	1.00	24.96
ATOM	2863	CG	LEU	64	11.853	16.614	-11.213	1.00	26.97
ATOM	2864	CD1	LEU	64	11.580	15.442	-12.152	1.00	28.52
ATOM	2865	CD2	LEU	64	13.329	16.705	-10.882	1.00	26.77
ATOM	2866	H	LEU	64	10.108	17.782	-14.188	1.00	0.00
ATOM	2867	N	ARG	65	9.471	20.104	-10.805	1.00	23.23
ATOM	2868	CA	ARG	65	9.219	21.493	-10.474	1.00	22.50
ATOM	2869	C	ARG	65	9.721	21.704	-9.052	1.00	22.11
ATOM	2870	O	ARG	65	9.804	20.750	-8.271	1.00	22.73
ATOM	2871	CB	ARG	65	7.721	21.796	-10.531	1.00	23.16
ATOM	2872	CG	ARG	65	7.140	21.829	-11.914	1.00	22.86
ATOM	2873	CD	ARG	65	7.728	22.963	-12.699	1.00	25.08
ATOM	2874	NE	ARG	65	7.825	22.594	-14.100	1.00	27.11
ATOM	2875	CZ	ARG	65	6.877	22.819	-14.999	1.00	27.62
ATOM	2876	NH1	ARG	65	5.749	23.428	-14.643	1.00	28.46
ATOM	2877	NH2	ARG	65	7.047	22.393	-16.241	1.00	28.68
ATOM	2878	H	ARG	65	9.476	19.442	-10.080	1.00	0.00

68/176

ATOM	2879	HE	ARG	65	8.651	22.085	-14.311	1.00	0.00
ATOM	2880	HH11	ARG	65	5.617	23.715	-13.689	1.00	0.00
ATOM	2881	HH12	ARG	65	5.006	23.621	-15.284	1.00	0.00
ATOM	2882	HH21	ARG	65	7.879	21.881	-16.479	1.00	0.00
ATOM	2883	HH22	ARG	65	6.370	22.515	-16.970	1.00	0.00
ATOM	2884	N	VAL	66	10.043	22.953	-8.728	1.00	20.10
ATOM	2885	CA	VAL	66	10.530	23.338	-7.409	1.00	17.28
ATOM	2886	C	VAL	66	9.613	24.402	-6.799	1.00	17.58
ATOM	2887	O	VAL	66	9.236	25.367	-7.466	1.00	18.98
ATOM	2888	CB	VAL	66	11.956	23.919	-7.511	1.00	14.84
ATOM	2889	CG1	VAL	66	12.364	24.570	-6.205	1.00	14.99
ATOM	2890	CG2	VAL	66	12.933	22.825	-7.878	1.00	14.12
ATOM	2891	H	VAL	66	9.993	23.638	-9.420	1.00	0.00
ATOM	2892	N	GLN	67	9.212	24.196	-5.555	1.00	15.80
ATOM	2893	CA	GLN	67	8.375	25.158	-4.858	1.00	14.72
ATOM	2894	C	GLN	67	9.218	25.660	-3.724	1.00	14.29
ATOM	2895	O	GLN	67	9.722	24.868	-2.950	1.00	16.53
ATOM	2896	CB	GLN	67	7.131	24.485	-4.291	1.00	14.76
ATOM	2897	CG	GLN	67	6.405	25.311	-3.242	1.00	16.40
ATOM	2898	CD	GLN	67	5.834	26.622	-3.776	1.00	19.05
ATOM	2899	OE1	GLN	67	6.067	27.011	-4.924	1.00	19.16
ATOM	2900	NE2	GLN	67	5.085	27.313	-2.934	1.00	20.50
ATOM	2901	H	GLN	67	9.454	23.368	-5.096	1.00	0.00
ATOM	2902	HE21	GLN	67	5.053	26.945	-2.028	1.00	0.00
ATOM	2903	HE22	GLN	67	4.519	28.065	-3.191	1.00	0.00
ATOM	2904	N	LEU	68	9.380	26.965	-3.615	1.00	15.17
ATOM	2905	CA	LEU	68	10.193	27.518	-2.537	1.00	18.04
ATOM	2906	C	LEU	68	9.415	27.477	-1.221	1.00	19.10
ATOM	2907	O	LEU	68	8.333	26.897	-1.169	1.00	20.36
ATOM	2908	CB	LEU	68	10.632	28.945	-2.889	1.00	19.50
ATOM	2909	CG	LEU	68	11.272	29.107	-4.282	1.00	21.10
ATOM	2910	CD1	LEU	68	11.599	30.560	-4.562	1.00	21.08
ATOM	2911	CD2	LEU	68	12.521	28.239	-4.414	1.00	21.93
ATOM	2912	H	LEU	68	8.938	27.552	-4.261	1.00	0.00
ATOM	2913	N	ARG	69	9.985	28.052	-0.162	1.00	20.44
ATOM	2914	CA	ARG	69	9.364	28.095	1.173	1.00	21.26
ATOM	2915	C	ARG	69	7.858	28.324	1.116	1.00	21.99
ATOM	2916	O	ARG	69	7.398	29.319	0.559	1.00	23.44
ATOM	2917	CB	ARG	69	10.009	29.204	2.007	1.00	22.01
ATOM	2918	CG	ARG	69	9.411	29.425	3.395	1.00	21.35
ATOM	2919	CD	ARG	69	9.821	28.351	4.375	1.00	19.91
ATOM	2920	NE	ARG	69	9.553	28.744	5.757	1.00	20.69
ATOM	2921	CZ	ARG	69	8.345	28.740	6.320	1.00	20.75
ATOM	2922	NH1	ARG	69	7.282	28.373	5.620	1.00	20.48
ATOM	2923	NH2	ARG	69	8.196	29.057	7.598	1.00	20.48
ATOM	2924	H	ARG	69	10.883	28.425	-0.269	1.00	0.00
ATOM	2925	HE	ARG	69	10.338	29.042	6.252	1.00	0.00
ATOM	2926	HH11	ARG	69	7.358	28.083	4.667	1.00	0.00
ATOM	2927	HH12	ARG	69	6.391	28.356	6.084	1.00	0.00
ATOM	2928	HH21	ARG	69	8.889	29.324	8.257	1.00	0.00
ATOM	2929	HH22	ARG	69	7.266	29.001	7.985	1.00	0.00
ATOM	2930	N	GLU	70	7.103	27.445	1.764	1.00	21.84
ATOM	2931	CA	GLU	70	5.651	27.532	1.763	1.00	22.23
ATOM	2932	C	GLU	70	5.104	26.969	3.076	1.00	23.30
ATOM	2933	O	GLU	70	5.443	25.846	3.452	1.00	23.20
ATOM	2934	CB	GLU	70	5.139	26.719	0.576	1.00	21.53
ATOM	2935	CG	GLU	70	3.662	26.816	0.277	1.00	21.77
ATOM	2936	CD	GLU	70	3.311	26.073	-0.996	1.00	22.44
ATOM	2937	OE1	GLU	70	2.392	26.511	-1.718	1.00	23.02
ATOM	2938	OE2	GLU	70	3.987	25.065	-1.297	1.00	22.45
ATOM	2939	H	GLU	70	7.514	26.683	2.224	1.00	0.00
ATOM	2940	N	GLN	71	4.300	27.754	3.795	1.00	24.46
ATOM	2941	CA	GLN	71	3.733	27.296	5.073	1.00	26.04

69/126

ATOM	2942	C	GLN	71	2.814	26.089	4.968	1.00	27.48
ATOM	2943	O	GLN	71	2.712	25.314	5.923	1.00	29.36
ATOM	2944	CB	GLN	71	2.951	28.402	5.779	1.00	26.68
ATOM	2945	CG	GLN	71	3.752	29.246	6.749	1.00	28.96
ATOM	2946	CD	GLN	71	4.430	28.450	7.855	1.00	28.60
ATOM	2947	OE1	GLN	71	5.638	28.574	8.048	1.00	30.20
ATOM	2948	NE2	GLN	71	3.665	27.659	8.595	1.00	27.33
ATOM	2949	H	GLN	71	4.068	28.640	3.448	1.00	0.00
ATOM	2950	HE21	GLN	71	2.713	27.548	8.437	1.00	0.00
ATOM	2951	HE22	GLN	71	4.140	27.223	9.342	1.00	0.00
ATOM	2952	N	HIS	72	2.100	25.967	3.850	1.00	26.56
ATOM	2953	CA	HIS	72	1.176	24.860	3.651	1.00	25.54
ATOM	2954	C	HIS	72	1.350	24.268	2.259	1.00	26.53
ATOM	2955	O	HIS	72	1.008	24.893	1.254	1.00	26.89
ATOM	2956	CB	HIS	72	-0.246	25.337	3.905	1.00	24.25
ATOM	2957	CG	HIS	72	-0.465	25.802	5.309	1.00	24.96
ATOM	2958	ND1	HIS	72	-0.510	24.935	6.379	1.00	25.83
ATOM	2959	CD2	HIS	72	-0.607	27.045	5.829	1.00	24.79
ATOM	2960	CE1	HIS	72	-0.671	25.619	7.497	1.00	25.14
ATOM	2961	NE2	HIS	72	-0.733	26.902	7.190	1.00	24.96
ATOM	2962	H	HIS	72	2.210	26.584	3.096	1.00	0.00
ATOM	2963	HD1	HIS	72	-0.410	23.963	6.263	1.00	0.00
ATOM	2964	HE2	HIS	72	-0.864	27.615	7.848	1.00	0.00
ATOM	2965	N	LEU	73	1.809	23.018	2.242	1.00	26.03
ATOM	2966	CA	LEU	73	2.134	22.267	1.030	1.00	26.58
ATOM	2967	C	LEU	73	1.599	22.527	-0.360	1.00	27.02
ATOM	2968	O	LEU	73	2.320	22.252	-1.321	1.00	30.14
ATOM	2969	CB	LEU	73	2.090	20.760	1.266	1.00	26.60
ATOM	2970	CG	LEU	73	3.444	20.068	1.433	1.00	25.39
ATOM	2971	CD1	LEU	73	3.340	18.656	0.913	1.00	25.50
ATOM	2972	CD2	LEU	73	4.535	20.811	0.687	1.00	25.01
ATOM	2973	H	LEU	73	1.958	22.584	3.113	1.00	0.00
ATOM	2974	N	TYR	74	0.343	22.917	-0.519	1.00	24.10
ATOM	2975	CA	TYR	74	-0.130	23.149	-1.879	1.00	23.81
ATOM	2976	C	TYR	74	-0.955	24.408	-1.978	1.00	27.06
ATOM	2977	O	TYR	74	-1.572	24.693	-3.003	1.00	26.99
ATOM	2978	CB	TYR	74	-0.928	21.950	-2.373	1.00	20.11
ATOM	2979	CG	TYR	74	-0.182	20.644	-2.260	1.00	17.05
ATOM	2980	CD1	TYR	74	-0.371	19.809	-1.162	1.00	16.55
ATOM	2981	CD2	TYR	74	0.718	20.246	-3.242	1.00	15.21
ATOM	2982	CE1	TYR	74	0.319	18.611	-1.044	1.00	15.49
ATOM	2983	CE2	TYR	74	1.411	19.053	-3.134	1.00	14.58
ATOM	2984	CZ	TYR	74	1.208	18.238	-2.036	1.00	15.33
ATOM	2985	OH	TYR	74	1.889	17.047	-1.926	1.00	16.08
ATOM	2986	H	TYR	74	-0.229	23.081	0.248	1.00	0.00
ATOM	2987	HH	TYR	74	1.801	16.700	-1.028	1.00	0.00
ATOM	2988	N	TYR	75	-0.931	25.186	-0.910	1.00	31.65
ATOM	2989	CA	TYR	75	-1.701	26.404	-0.846	1.00	36.39
ATOM	2990	C	TYR	75	-0.778	27.556	-1.244	1.00	39.17
ATOM	2991	O	TYR	75	0.125	27.939	-0.495	1.00	41.04
ATOM	2992	CB	TYR	75	-2.295	26.557	0.568	1.00	39.44
ATOM	2993	CG	TYR	75	-3.060	25.311	1.049	1.00	42.68
ATOM	2994	CD1	TYR	75	-2.380	24.169	1.493	1.00	44.08
ATOM	2995	CD2	TYR	75	-4.455	25.262	1.028	1.00	43.19
ATOM	2996	CE1	TYR	75	-3.073	23.015	1.898	1.00	43.78
ATOM	2997	CE2	TYR	75	-5.153	24.109	1.433	1.00	43.52
ATOM	2998	CZ	TYR	75	-4.455	22.994	1.866	1.00	43.62
ATOM	2999	OH	TYR	75	-5.137	21.864	2.268	1.00	43.43
ATOM	3000	H	TYR	75	-0.265	25.020	-0.212	1.00	0.00
ATOM	3001	HH	TYR	75	-6.095	22.027	2.259	1.00	0.00
ATOM	3002	N	GLN	79	-1.011	28.062	-2.454	1.00	40.20
ATOM	3003	CA	GLN	79	-0.256	29.155	-3.079	1.00	40.33
ATOM	3004	C	GLN	79	0.962	28.596	-3.789	1.00	37.64

90/176

ATOM	3005	O	GLN	79	2.074	29.115	-3.683	1.00	36.67
ATOM	3006	CB	GLN	79	0.124	30.271	-2.086	1.00	45.26
ATOM	3007	CG	GLN	79	0.853	31.509	-2.704	1.00	51.67
ATOM	3008	CD	GLN	79	0.066	32.239	-3.813	1.00	54.23
ATOM	3009	OE1	GLN	79	-1.125	32.540	-3.664	1.00	55.60
ATOM	3010	NE2	GLN	79	0.750	32.553	-4.913	1.00	53.74
ATOM	3011	H	GLN	79	-1.717	27.635	-2.978	1.00	0.00
ATOM	3012	HE21	GLN	79	1.706	32.319	-4.951	1.00	0.00
ATOM	3013	HE22	GLN	79	0.269	33.003	-5.631	1.00	0.00
ATOM	3014	N	ASP	80	0.730	27.512	-4.514	1.00	35.38
ATOM	3015	CA	ASP	80	1.781	26.876	-5.280	1.00	33.84
ATOM	3016	C	ASP	80	2.280	27.868	-6.316	1.00	33.21
ATOM	3017	O	ASP	80	1.506	28.658	-6.853	1.00	33.16
ATOM	3018	CB	ASP	80	1.236	25.644	-6.000	1.00	33.14
ATOM	3019	CG	ASP	80	1.616	24.352	-5.318	1.00	31.13
ATOM	3020	OD1	ASP	80	2.074	24.394	-4.160	1.00	30.14
ATOM	3021	OD2	ASP	80	1.468	23.286	-5.952	1.00	29.87
ATOM	3022	H	ASP	80	-0.147	27.096	-4.508	1.00	0.00
ATOM	3023	N	GLN	81	3.575	27.812	-6.592	1.00	33.02
ATOM	3024	CA	GLN	81	4.220	28.675	-7.572	1.00	32.15
ATOM	3025	C	GLN	81	5.454	27.907	-8.035	1.00	29.69
ATOM	3026	O	GLN	81	6.595	28.306	-7.801	1.00	29.42
ATOM	3027	CB	GLN	81	4.586	30.018	-6.935	1.00	35.77
ATOM	3028	CG	GLN	81	5.297	29.901	-5.590	1.00	41.85
ATOM	3029	CD	GLN	81	4.686	30.786	-4.505	1.00	45.18
ATOM	3030	OE1	GLN	81	4.149	31.867	-4.783	1.00	45.71
ATOM	3031	NE2	GLN	81	4.769	30.326	-3.257	1.00	45.70
ATOM	3032	H	GLN	81	4.122	27.157	-6.102	1.00	0.00
ATOM	3033	HE21	GLN	81	5.209	29.474	-3.068	1.00	0.00
ATOM	3034	HE22	GLN	81	4.349	30.887	-2.576	1.00	0.00
ATOM	3035	N	LEU	82	5.192	26.765	-8.661	1.00	26.81
ATOM	3036	CA	LEU	82	6.225	25.864	-9.158	1.00	24.87
ATOM	3037	C	LEU	82	7.261	26.524	-10.070	1.00	24.59
ATOM	3038	O	LEU	82	6.938	27.426	-10.837	1.00	26.38
ATOM	3039	CB	LEU	82	5.579	24.674	-9.881	1.00	21.39
ATOM	3040	CG	LEU	82	4.519	23.854	-9.139	1.00	18.22
ATOM	3041	CD1	LEU	82	4.728	23.958	-7.647	1.00	18.78
ATOM	3042	CD2	LEU	82	3.134	24.336	-9.488	1.00	20.24
ATOM	3043	H	LEU	82	4.250	26.550	-8.792	1.00	0.00
ATOM	3044	N	LEU	83	8.504	26.067	-9.981	1.00	22.76
ATOM	3045	CA	LEU	83	9.577	26.605	-10.799	1.00	22.62
ATOM	3046	C	LEU	83	10.222	25.495	-11.621	1.00	24.07
ATOM	3047	O	LEU	83	10.481	24.402	-11.107	1.00	23.84
ATOM	3048	CB	LEU	83	10.640	27.258	-9.919	1.00	21.97
ATOM	3049	CG	LEU	83	10.183	28.361	-8.970	1.00	22.43
ATOM	3050	CD1	LEU	83	11.392	29.007	-8.320	1.00	22.99
ATOM	3051	CD2	LEU	83	9.388	29.397	-9.730	1.00	24.38
ATOM	3052	H	LEU	83	8.716	25.397	-9.304	1.00	0.00
ATOM	3053	N	PRO	84	10.445	25.739	-12.923	1.00	24.83
ATOM	3054	CA	PRO	84	11.064	24.737	-13.788	1.00	25.04
ATOM	3055	C	PRO	84	12.568	24.606	-13.539	1.00	26.70
ATOM	3056	O	PRO	84	13.240	25.567	-13.143	1.00	26.43
ATOM	3057	CB	PRO	84	10.771	25.273	-15.183	1.00	24.05
ATOM	3058	CG	PRO	84	10.820	26.734	-14.987	1.00	24.45
ATOM	3059	CD	PRO	84	10.036	26.914	-13.711	1.00	25.04
ATOM	3060	N	VAL	85	13.069	23.395	-13.763	1.00	27.88
ATOM	3061	CA	VAL	85	14.474	23.050	-13.597	1.00	26.80
ATOM	3062	C	VAL	85	15.106	22.978	-14.981	1.00	27.62
ATOM	3063	O	VAL	85	14.478	22.512	-15.931	1.00	29.02
ATOM	3064	CB	VAL	85	14.603	21.677	-12.927	1.00	25.93
ATOM	3065	CG1	VAL	85	16.045	21.216	-12.923	1.00	26.71
ATOM	3066	CG2	VAL	85	14.057	21.743	-11.517	1.00	27.01
ATOM	3067	H	VAL	85	12.479	22.686	-14.091	1.00	0.00

ATOM	3068	N	SER	86	16.357	23.401	-15.089	1.00	27.09
ATOM	3069	CA	SER	86	17.052	23.383	-16.365	1.00	26.70
ATOM	3070	C	SER	86	18.112	22.297	-16.434	1.00	26.19
ATOM	3071	O	SER	86	18.439	21.788	-17.516	1.00	27.64
ATOM	3072	CB	SER	86	17.690	24.743	-16.619	1.00	27.96
ATOM	3073	OG	SER	86	18.409	25.162	-15.478	1.00	30.97
ATOM	3074	H	SER	86	16.834	23.716	-14.302	1.00	0.00
ATOM	3075	HG	SER	86	18.180	26.055	-15.190	1.00	0.00
ATOM	3076	N	ARG	87	18.625	21.900	-15.281	1.00	24.37
ATOM	3077	CA	ARG	87	19.661	20.893	-15.286	1.00	23.98
ATOM	3078	C	ARG	87	19.688	20.201	-13.942	1.00	21.85
ATOM	3079	O	ARG	87	19.490	20.841	-12.912	1.00	21.59
ATOM	3080	CB	ARG	87	20.990	21.593	-15.587	1.00	26.89
ATOM	3081	CG	ARG	87	22.136	20.709	-16.036	1.00	29.45
ATOM	3082	CD	ARG	87	23.149	21.515	-16.846	1.00	29.90
ATOM	3083	NE	ARG	87	23.399	22.830	-16.267	1.00	30.32
ATOM	3084	CZ	ARG	87	24.595	23.284	-15.904	1.00	30.98
ATOM	3085	NH1	ARG	87	25.672	22.524	-16.059	1.00	30.98
ATOM	3086	NH2	ARG	87	24.707	24.499	-15.372	1.00	30.47
ATOM	3087	H	ARG	87	18.353	22.309	-14.434	1.00	0.00
ATOM	3088	HE	ARG	87	22.628	23.433	-16.122	1.00	0.00
ATOM	3089	HH11	ARG	87	25.618	21.608	-16.475	1.00	0.00
ATOM	3090	HH12	ARG	87	26.589	22.864	-15.797	1.00	0.00
ATOM	3091	HH21	ARG	87	23.869	25.063	-15.222	1.00	0.00
ATOM	3092	HH22	ARG	87	25.564	24.907	-15.064	1.00	0.00
ATOM	3093	N	ILE	88	19.850	18.884	-13.969	1.00	20.50
ATOM	3094	CA	ILE	88	19.913	18.066	-12.759	1.00	22.18
ATOM	3095	C	ILE	88	21.308	17.445	-12.703	1.00	23.46
ATOM	3096	O	ILE	88	21.732	16.771	-13.644	1.00	24.82
ATOM	3097	CB	ILE	88	18.859	16.913	-12.780	1.00	22.63
ATOM	3098	CG1	ILE	88	17.438	17.481	-12.817	1.00	23.16
ATOM	3099	CG2	ILE	88	19.027	15.995	-11.572	1.00	20.50
ATOM	3100	H	ILE	88	19.953	18.439	-14.842	1.00	0.00
ATOM	3101	CD	ILE	88	16.370	16.419	-12.796	1.00	24.85
ATOM	3102	N	ILE	89	22.032	17.687	-11.620	1.00	23.34
ATOM	3103	CA	ILE	89	23.373	17.139	-11.481	1.00	22.63
ATOM	3104	C	ILE	89	23.463	16.186	-10.300	1.00	22.23
ATOM	3105	O	ILE	89	23.388	16.596	-9.140	1.00	22.16
ATOM	3106	CB	ILE	89	24.425	18.255	-11.399	1.00	22.65
ATOM	3107	CG1	ILE	89	24.535	18.926	-12.769	1.00	22.29
ATOM	3108	CG2	ILE	89	25.770	17.695	-10.969	1.00	22.49
ATOM	3109	H	ILE	89	21.661	18.228	-10.916	1.00	0.00
ATOM	3110	CD	ILE	89	25.457	20.087	-12.806	1.00	25.72
ATOM	3111	N	VAL	90	23.561	14.901	-10.629	1.00	21.11
ATOM	3112	CA	VAL	90	23.642	13.825	-9.652	1.00	18.37
ATOM	3113	C	VAL	90	25.093	13.402	-9.491	1.00	16.51
ATOM	3114	O	VAL	90	25.788	13.168	-10.480	1.00	14.67
ATOM	3115	CB	VAL	90	22.807	12.613	-10.112	1.00	17.30
ATOM	3116	CG1	VAL	90	22.950	11.458	-9.139	1.00	19.21
ATOM	3117	CG2	VAL	90	21.356	13.007	-10.240	1.00	17.04
ATOM	3118	H	VAL	90	23.611	14.677	-11.581	1.00	0.00
ATOM	3119	N	HIS	91	25.550	13.323	-8.245	1.00	14.91
ATOM	3120	CA	HIS	91	26.912	12.927	-7.984	1.00	14.56
ATOM	3121	C	HIS	91	27.140	11.568	-8.620	1.00	16.19
ATOM	3122	O	HIS	91	26.495	10.587	-8.261	1.00	17.08
ATOM	3123	CB	HIS	91	27.180	12.852	-6.491	1.00	14.24
ATOM	3124	CG	HIS	91	28.632	12.716	-6.158	1.00	13.82
ATOM	3125	ND1	HIS	91	29.425	13.794	-5.824	1.00	14.00
ATOM	3126	CD2	HIS	91	29.446	11.635	-6.144	1.00	12.66
ATOM	3127	CE1	HIS	91	30.661	13.384	-5.618	1.00	12.98
ATOM	3128	NE2	HIS	91	30.700	12.078	-5.807	1.00	13.51
ATOM	3129	H	HIS	91	24.957	13.508	-7.484	1.00	0.00
ATOM	3130	HD1	HIS	91	29.117	14.726	-5.748	1.00	0.00

ATOM	3131	HE2	HIS	91	31.515	11.538	-5.714	1.00	0.00
ATOM	3132	N	PRO	92	28.130	11.478	-9.513	1.00	17.82
ATOM	3133	CA	PRO	92	28.496	10.255	-10.239	1.00	17.81
ATOM	3134	C	PRO	92	28.666	8.970	-9.442	1.00	17.65
ATOM	3135	O	PRO	92	28.420	7.893	-9.970	1.00	19.34
ATOM	3136	CB	PRO	92	29.791	10.648	-10.956	1.00	17.26
ATOM	3137	CG	PRO	92	30.326	11.790	-10.127	1.00	18.76
ATOM	3138	CD	PRO	92	29.086	12.560	-9.803	1.00	18.30
ATOM	3139	N	GLN	93	29.092	9.065	-8.190	1.00	17.14
ATOM	3140	CA	GLN	93	29.292	7.863	-7.392	1.00	18.42
ATOM	3141	C	GLN	93	28.035	7.359	-6.739	1.00	18.03
ATOM	3142	O	GLN	93	28.070	6.372	-6.005	1.00	19.16
ATOM	3143	CB	GLN	93	30.350	8.084	-6.318	1.00	22.02
ATOM	3144	CG	GLN	93	31.728	8.382	-6.864	1.00	28.17
ATOM	3145	CD	GLN	93	32.828	7.919	-5.935	1.00	31.41
ATOM	3146	OE1	GLN	93	33.531	6.946	-6.227	1.00	33.61
ATOM	3147	NE2	GLN	93	32.981	8.605	-4.804	1.00	32.92
ATOM	3148	H	GLN	93	29.242	9.942	-7.818	1.00	0.00
ATOM	3149	HE21	GLN	93	32.406	9.350	-4.576	1.00	0.00
ATOM	3150	HE22	GLN	93	33.719	8.285	-4.245	1.00	0.00
ATOM	3151	N	PHE	94	26.922	8.030	-6.995	1.00	17.80
ATOM	3152	CA	PHE	94	25.674	7.621	-6.389	1.00	17.79
ATOM	3153	C	PHE	94	24.954	6.511	-7.102	1.00	17.90
ATOM	3154	O	PHE	94	24.847	6.509	-8.322	1.00	19.86
ATOM	3155	CB	PHE	94	24.700	8.786	-6.259	1.00	18.50
ATOM	3156	CG	PHE	94	23.375	8.384	-5.676	1.00	20.01
ATOM	3157	CD1	PHE	94	23.276	8.011	-4.336	1.00	20.50
ATOM	3158	CD2	PHE	94	22.238	8.316	-6.472	1.00	21.38
ATOM	3159	CE1	PHE	94	22.073	7.571	-3.803	1.00	19.68
ATOM	3160	CE2	PHE	94	21.025	7.876	-5.942	1.00	21.21
ATOM	3161	CZ	PHE	94	20.949	7.504	-4.606	1.00	20.25
ATOM	3162	H	PHE	94	26.870	8.777	-7.617	1.00	0.00
ATOM	3163	N	TYR	95	24.429	5.587	-6.312	1.00	18.03
ATOM	3164	CA	TYR	95	23.629	4.479	-6.813	1.00	18.49
ATOM	3165	C	TYR	95	22.711	3.996	-5.689	1.00	17.84
ATOM	3166	O	TYR	95	21.598	3.548	-5.936	1.00	19.19
ATOM	3167	CB	TYR	95	24.473	3.310	-7.346	1.00	20.03
ATOM	3168	CG	TYR	95	23.590	2.189	-7.867	1.00	22.55
ATOM	3169	CD1	TYR	95	22.914	2.313	-9.086	1.00	23.53
ATOM	3170	CD2	TYR	95	23.324	1.063	-7.085	1.00	22.97
ATOM	3171	CE1	TYR	95	21.986	1.352	-9.506	1.00	23.67
ATOM	3172	CE2	TYR	95	22.397	0.098	-7.495	1.00	23.89
ATOM	3173	CZ	TYR	95	21.730	0.251	-8.702	1.00	24.25
ATOM	3174	OH	TYR	95	20.796	-0.688	-9.082	1.00	25.15
ATOM	3175	H	TYR	95	24.612	5.705	-5.360	1.00	0.00
ATOM	3176	HH	TYR	95	20.347	-0.398	-9.893	1.00	0.00
ATOM	3177	N	THR	96	23.174	4.120	-4.451	1.00	16.68
ATOM	3178	CA	THR	96	22.410	3.696	-3.289	1.00	14.87
ATOM	3179	C	THR	96	22.768	4.584	-2.106	1.00	15.76
ATOM	3180	O	THR	96	23.901	5.050	-1.991	1.00	16.26
ATOM	3181	CB	THR	96	22.732	2.229	-2.947	1.00	14.73
ATOM	3182	OG1	THR	96	21.909	1.357	-3.725	1.00	16.07
ATOM	3183	CG2	THR	96	22.526	1.948	-1.499	1.00	14.86
ATOM	3184	H	THR	96	24.069	4.484	-4.291	1.00	0.00
ATOM	3185	HG1	THR	96	20.987	1.624	-3.669	1.00	0.00
ATOM	3186	N	ALA	97	21.799	4.816	-1.229	1.00	16.38
ATOM	3187	CA	ALA	97	22.018	5.638	-0.048	1.00	16.61
ATOM	3188	C	ALA	97	23.063	5.003	0.871	1.00	18.45
ATOM	3189	O	ALA	97	24.058	5.629	1.208	1.00	20.27
ATOM	3190	CB	ALA	97	20.715	5.828	0.698	1.00	16.35
ATOM	3191	H	ALA	97	20.919	4.418	-1.380	1.00	0.00
ATOM	3192	N	GLN	98	22.862	3.734	1.220	1.00	20.21
ATOM	3193	CA	GLN	98	23.764	2.996	2.117	1.00	21.87

73/176

ATOM	3194	C	GLN	98	25.193	2.980	1.597	1.00	20.81
ATOM	3195	O	GLN	98	26.151	2.835	2.361	1.00	19.93
ATOM	3196	CB	GLN	98	23.295	1.544	2.297	1.00	24.44
ATOM	3197	CG	GLN	98	21.982	1.371	3.035	1.00	27.69
ATOM	3198	CD	GLN	98	20.818	2.007	2.311	1.00	30.78
ATOM	3199	OE1	GLN	98	20.808	2.094	1.084	1.00	31.89
ATOM	3200	NE2	GLN	98	19.836	2.476	3.066	1.00	33.22
ATOM	3201	H	GLN	98	22.113	3.291	0.794	1.00	0.00
ATOM	3202	HE21	GLN	98	19.928	2.360	4.032	1.00	0.00
ATOM	3203	HE22	GLN	98	19.073	2.895	2.610	1.00	0.00
ATOM	3204	N	ILE	99	25.317	3.046	0.280	1.00	20.30
ATOM	3205	CA	ILE	99	26.611	3.052	-0.358	1.00	21.90
ATOM	3206	C	ILE	99	27.280	4.406	-0.124	1.00	23.75
ATOM	3207	O	ILE	99	28.421	4.453	0.332	1.00	26.39
ATOM	3208	CB	ILE	99	26.480	2.689	-1.850	1.00	21.91
ATOM	3209	CG1	ILE	99	26.382	1.166	-1.985	1.00	21.54
ATOM	3210	CG2	ILE	99	27.633	3.255	-2.653	1.00	24.65
ATOM	3211	H	ILE	99	24.518	3.118	-0.269	1.00	0.00
ATOM	3212	CD	ILE	99	26.231	0.657	-3.394	1.00	19.95
ATOM	3213	N	GLY	100	26.570	5.498	-0.401	1.00	23.83
ATOM	3214	CA	GLY	100	27.129	6.822	-0.174	1.00	21.64
ATOM	3215	C	GLY	100	26.976	7.786	-1.333	1.00	20.52
ATOM	3216	O	GLY	100	26.308	7.494	-2.325	1.00	19.73
ATOM	3217	H	GLY	100	25.683	5.438	-0.817	1.00	0.00
ATOM	3218	N	ALA	101	27.577	8.960	-1.186	1.00	20.72
ATOM	3219	CA	ALA	101	27.542	9.994	-2.211	1.00	20.27
ATOM	3220	C	ALA	101	26.154	10.540	-2.481	1.00	19.41
ATOM	3221	O	ALA	101	25.931	11.192	-3.496	1.00	21.65
ATOM	3222	CB	ALA	101	28.158	9.477	-3.505	1.00	19.99
ATOM	3223	H	ALA	101	28.094	9.152	-0.370	1.00	0.00
ATOM	3224	N	ASP	102	25.240	10.343	-1.544	1.00	17.49
ATOM	3225	CA	ASP	102	23.873	10.806	-1.724	1.00	15.51
ATOM	3226	C	ASP	102	23.738	12.320	-1.696	1.00	15.17
ATOM	3227	O	ASP	102	23.385	12.902	-0.676	1.00	15.11
ATOM	3228	CB	ASP	102	22.974	10.197	-0.660	1.00	15.37
ATOM	3229	CG	ASP	102	21.526	10.219	-1.048	1.00	16.45
ATOM	3230	OD1	ASP	102	21.174	10.789	-2.096	1.00	16.31
ATOM	3231	OD2	ASP	102	20.719	9.642	-0.306	1.00	19.62
ATOM	3232	H	ASP	102	25.491	9.899	-0.710	1.00	0.00
ATOM	3233	N	ILE	103	23.992	12.957	-2.829	1.00	14.64
ATOM	3234	CA	ILE	103	23.890	14.404	-2.921	1.00	14.84
ATOM	3235	C	ILE	103	23.626	14.746	-4.389	1.00	15.54
ATOM	3236	O	ILE	103	24.140	14.065	-5.292	1.00	15.63
ATOM	3237	CB	ILE	103	25.195	15.082	-2.384	1.00	15.38
ATOM	3238	CG1	ILE	103	24.935	16.540	-1.988	1.00	14.76
ATOM	3239	CG2	ILE	103	26.327	14.967	-3.404	1.00	14.78
ATOM	3240	H	ILE	103	24.286	12.439	-3.609	1.00	0.00
ATOM	3241	CD	ILE	103	26.094	17.201	-1.268	1.00	11.34
ATOM	3242	N	ALA	104	22.785	15.753	-4.623	1.00	15.37
ATOM	3243	CA	ALA	104	22.428	16.178	-5.976	1.00	15.05
ATOM	3244	C	ALA	104	22.124	17.660	-6.019	1.00	15.32
ATOM	3245	O	ALA	104	21.809	18.263	-4.996	1.00	16.76
ATOM	3246	CB	ALA	104	21.236	15.399	-6.472	1.00	15.24
ATOM	3247	H	ALA	104	22.358	16.234	-3.890	1.00	0.00
ATOM	3248	N	LEU	105	22.200	18.228	-7.215	1.00	15.71
ATOM	3249	CA	LEU	105	21.960	19.646	-7.442	1.00	17.31
ATOM	3250	C	LEU	105	20.948	19.862	-8.561	1.00	19.06
ATOM	3251	O	LEU	105	21.033	19.222	-9.611	1.00	19.06
ATOM	3252	CB	LEU	105	23.262	20.328	-7.868	1.00	17.05
ATOM	3253	CG	LEU	105	24.444	20.403	-6.910	1.00	16.15
ATOM	3254	CD1	LEU	105	25.683	20.853	-7.669	1.00	15.03
ATOM	3255	CD2	LEU	105	24.113	21.362	-5.777	1.00	16.80
ATOM	3256	H	LEU	105	22.468	17.677	-7.971	1.00	0.00

74/176

ATOM	3257	N	LEU	106	20.015	20.784	-8.354	1.00	18.81
ATOM	3258	CA	LEU	106	19.022	21.095	-9.369	1.00	18.38
ATOM	3259	C	LEU	106	19.249	22.552	-9.721	1.00	19.95
ATOM	3260	O	LEU	106	19.358	23.389	-8.827	1.00	20.25
ATOM	3261	CB	LEU	106	17.613	20.923	-8.818	1.00	18.45
ATOM	3262	CG	LEU	106	17.302	19.714	-7.932	1.00	19.10
ATOM	3263	CD1	LEU	106	15.795	19.581	-7.795	1.00	19.66
ATOM	3264	CD2	LEU	106	17.867	18.445	-8.518	1.00	20.28
ATOM	3265	H	LEU	106	20.026	21.246	-7.491	1.00	0.00
ATOM	3266	N	GLU	107	19.400	22.844	-11.006	1.00	21.93
ATOM	3267	CA	GLU	107	19.623	24.215	-11.452	1.00	24.66
ATOM	3268	C	GLU	107	18.293	24.778	-11.904	1.00	25.13
ATOM	3269	O	GLU	107	17.572	24.129	-12.664	1.00	26.66
ATOM	3270	CB	GLU	107	20.631	24.252	-12.614	1.00	26.28
ATOM	3271	CG	GLU	107	20.927	25.657	-13.160	1.00	27.29
ATOM	3272	CD	GLU	107	21.953	25.661	-14.289	1.00	29.17
ATOM	3273	OE1	GLU	107	22.959	26.386	-14.187	1.00	30.52
ATOM	3274	OE2	GLU	107	21.777	24.940	-15.293	1.00	31.23
ATOM	3275	H	GLU	107	19.378	22.140	-11.669	1.00	0.00
ATOM	3276	N	LEU	108	17.948	25.966	-11.422	1.00	23.99
ATOM	3277	CA	LEU	108	16.689	26.587	-11.803	1.00	24.64
ATOM	3278	C	LEU	108	16.868	27.234	-13.171	1.00	29.15
ATOM	3279	O	LEU	108	17.994	27.557	-13.555	1.00	30.56
ATOM	3280	CB	LEU	108	16.282	27.628	-10.766	1.00	20.08
ATOM	3281	CG	LEU	108	16.096	27.099	-9.345	1.00	17.40
ATOM	3282	CD1	LEU	108	15.604	28.210	-8.446	1.00	17.94
ATOM	3283	CD2	LEU	108	15.110	25.953	-9.327	1.00	15.86
ATOM	3284	H	LEU	108	18.597	26.433	-10.858	1.00	0.00
ATOM	3285	N	GLU	109	15.783	27.393	-13.925	1.00	34.05
ATOM	3286	CA	GLU	109	15.878	28.014	-15.249	1.00	39.14
ATOM	3287	C	GLU	109	16.218	29.495	-15.112	1.00	41.66
ATOM	3288	O	GLU	109	16.942	30.053	-15.934	1.00	42.60
ATOM	3289	CB	GLU	109	14.579	27.842	-16.047	1.00	41.87
ATOM	3290	CG	GLU	109	14.169	26.380	-16.270	1.00	47.69
ATOM	3291	CD	GLU	109	14.120	25.960	-17.742	1.00	50.47
ATOM	3292	OE1	GLU	109	13.324	25.050	-18.074	1.00	51.05
ATOM	3293	OE2	GLU	109	14.887	26.517	-18.561	1.00	51.80
ATOM	3294	H	GLU	109	14.908	27.060	-13.609	1.00	0.00
ATOM	3295	N	GLU	110	15.729	30.114	-14.045	1.00	44.14
ATOM	3296	CA	GLU	110	15.978	31.528	-13.784	1.00	47.55
ATOM	3297	C	GLU	110	16.286	31.701	-12.299	1.00	48.50
ATOM	3298	O	GLU	110	15.821	30.916	-11.467	1.00	49.30
ATOM	3299	CB	GLU	110	14.744	32.357	-14.154	1.00	50.55
ATOM	3300	CG	GLU	110	13.481	31.919	-13.414	1.00	54.94
ATOM	3301	CD	GLU	110	12.254	32.729	-13.785	1.00	56.79
ATOM	3302	OE1	GLU	110	11.801	33.542	-12.950	1.00	58.86
ATOM	3303	OE2	GLU	110	11.732	32.540	-14.904	1.00	57.42
ATOM	3304	H	GLU	110	15.183	29.613	-13.398	1.00	0.00
ATOM	3305	N	PRO	111	17.128	32.687	-11.952	1.00	48.50
ATOM	3306	CA	PRO	111	17.479	32.931	-10.550	1.00	48.59
ATOM	3307	C	PRO	111	16.286	33.490	-9.783	1.00	49.59
ATOM	3308	O	PRO	111	15.459	34.215	-10.342	1.00	49.69
ATOM	3309	CB	PRO	111	18.594	33.971	-10.653	1.00	48.14
ATOM	3310	CG	PRO	111	19.174	33.734	-12.013	1.00	48.12
ATOM	3311	CD	PRO	111	17.945	33.522	-12.845	1.00	48.37
ATOM	3312	N	VAL	112	16.201	33.153	-8.505	1.00	50.84
ATOM	3313	CA	VAL	112	15.110	33.622	-7.668	1.00	53.38
ATOM	3314	C	VAL	112	15.533	34.865	-6.901	1.00	56.72
ATOM	3315	O	VAL	112	16.601	34.887	-6.287	1.00	58.71
ATOM	3316	CB	VAL	112	14.653	32.536	-6.664	1.00	52.88
ATOM	3317	CG1	VAL	112	14.176	31.304	-7.407	1.00	53.74
ATOM	3318	CG2	VAL	112	15.776	32.173	-5.708	1.00	52.31
ATOM	3319	H	VAL	112	16.926	32.607	-8.142	1.00	0.00

75/176

ATOM	3320	N	LYS	113	14.722	35.917	-6.970	1.00	58.96
ATOM	3321	CA	LYS	113	15.022	37.152	-6.248	1.00	60.41
ATOM	3322	C	LYS	113	14.853	36.838	-4.765	1.00	60.77
ATOM	3323	O	LYS	113	13.757	36.967	-4.216	1.00	61.43
ATOM	3324	CB	LYS	113	14.057	38.276	-6.647	1.00	61.58
ATOM	3325	CG	LYS	113	13.890	38.485	-8.147	1.00	63.29
ATOM	3326	CD	LYS	113	12.543	37.954	-8.629	1.00	65.05
ATOM	3327	CE	LYS	113	11.376	38.698	-7.973	1.00	65.70
ATOM	3328	NZ	LYS	113	10.048	38.167	-8.401	1.00	66.27
ATOM	3329	H	LYS	113	13.925	35.825	-7.520	1.00	0.00
ATOM	3330	HZ1	LYS	113	9.962	37.166	-8.136	1.00	0.00
ATOM	3331	HZ2	LYS	113	9.955	38.272	-9.432	1.00	0.00
ATOM	3332	HZ3	LYS	113	9.304	38.717	-7.925	1.00	0.00
ATOM	3333	N	VAL	114	15.925	36.360	-4.147	1.00	60.71
ATOM	3334	CA	VAL	114	15.908	36.001	-2.738	1.00	60.67
ATOM	3335	C	VAL	114	15.500	37.157	-1.829	1.00	60.65
ATOM	3336	O	VAL	114	16.274	38.086	-1.592	1.00	60.82
ATOM	3337	CB	VAL	114	17.264	35.410	-2.300	1.00	61.10
ATOM	3338	CG1	VAL	114	17.445	34.025	-2.915	1.00	61.42
ATOM	3339	CG2	VAL	114	18.408	36.323	-2.726	1.00	61.09
ATOM	3340	H	VAL	114	16.737	36.214	-4.674	1.00	0.00
ATOM	3341	N	SER	115	14.267	37.102	-1.340	1.00	61.08
ATOM	3342	CA	SER	115	13.732	38.139	-0.466	1.00	61.41
ATOM	3343	C	SER	115	13.957	37.844	1.021	1.00	61.79
ATOM	3344	O	SER	115	14.564	36.829	1.387	1.00	62.53
ATOM	3345	CB	SER	115	12.238	38.347	-0.752	1.00	60.84
ATOM	3346	OG	SER	115	11.484	37.178	-0.475	1.00	60.27
ATOM	3347	H	SER	115	13.706	36.338	-1.597	1.00	0.00
ATOM	3348	HG	SER	115	11.199	37.174	0.429	1.00	0.00
ATOM	3349	N	SER	116	13.436	38.720	1.876	1.00	61.44
ATOM	3350	CA	SER	116	13.566	38.573	3.325	1.00	61.01
ATOM	3351	C	SER	116	12.974	37.259	3.839	1.00	59.89
ATOM	3352	O	SER	116	13.434	36.709	4.844	1.00	58.72
ATOM	3353	CB	SER	116	12.889	39.756	4.028	1.00	61.11
ATOM	3354	OG	SER	116	11.542	39.897	3.604	1.00	61.47
ATOM	3355	H	SER	116	12.965	39.513	1.546	1.00	0.00
ATOM	3356	HG	SER	116	11.260	40.769	3.917	1.00	0.00
ATOM	3357	N	HIS	117	11.971	36.753	3.129	1.00	59.62
ATOM	3358	CA	HIS	117	11.302	35.514	3.517	1.00	59.34
ATOM	3359	C	HIS	117	11.737	34.297	2.695	1.00	56.48
ATOM	3360	O	HIS	117	11.407	33.165	3.050	1.00	56.61
ATOM	3361	CB	HIS	117	9.776	35.680	3.430	1.00	63.09
ATOM	3362	CG	HIS	117	9.255	36.924	4.090	1.00	66.88
ATOM	3363	ND1	HIS	117	9.417	37.184	5.436	1.00	67.62
ATOM	3364	CD2	HIS	117	8.580	37.985	3.583	1.00	67.79
ATOM	3365	CE1	HIS	117	8.866	38.349	5.728	1.00	68.20
ATOM	3366	NE2	HIS	117	8.352	38.855	4.622	1.00	68.20
ATOM	3367	H	HIS	117	11.705	37.219	2.318	1.00	0.00
ATOM	3368	HD1	HIS	117	9.878	36.624	6.106	1.00	0.00
ATOM	3369	HE2	HIS	117	7.875	39.714	4.550	1.00	0.00
ATOM	3370	N	VAL	118	12.467	34.527	1.604	1.00	52.48
ATOM	3371	CA	VAL	118	12.937	33.444	0.739	1.00	48.37
ATOM	3372	C	VAL	118	14.356	33.705	0.246	1.00	46.52
ATOM	3373	O	VAL	118	14.562	34.432	-0.721	1.00	45.40
ATOM	3374	CB	VAL	118	12.004	33.257	-0.480	1.00	46.79
ATOM	3375	CG1	VAL	118	12.673	32.415	-1.553	1.00	46.40
ATOM	3376	CG2	VAL	118	10.720	32.593	-0.041	1.00	46.79
ATOM	3377	H	VAL	118	12.723	35.429	1.328	1.00	0.00
ATOM	3378	N	HIS	119	15.334	33.121	0.927	1.00	45.06
ATOM	3379	CA	HIS	119	16.725	33.294	0.536	1.00	43.51
ATOM	3380	C	HIS	119	17.584	32.079	0.860	1.00	41.34
ATOM	3381	O	HIS	119	17.141	31.157	1.547	1.00	41.25
ATOM	3382	CB	HIS	119	17.328	34.578	1.126	1.00	44.71

ATOM	3383	CG	HIS	119	17.256	34.664	2.618	1.00	45.16
ATOM	3384	ND1	HIS	119	16.287	35.392	3.273	1.00	45.96
ATOM	3385	CD2	HIS	119	18.054	34.148	3.582	1.00	46.03
ATOM	3386	CE1	HIS	119	16.490	35.324	4.576	1.00	47.16
ATOM	3387	NE2	HIS	119	17.558	34.575	4.790	1.00	47.71
ATOM	3388	H	HIS	119	15.120	32.488	1.647	1.00	0.00
ATOM	3389	HD1	HIS	119	15.585	35.902	2.803	1.00	0.00
ATOM	3390	HE2	HIS	119	17.950	34.357	5.664	1.00	0.00
ATOM	3391	N	THR	120	18.819	32.106	0.372	1.00	38.34
ATOM	3392	CA	THR	120	19.766	31.013	0.541	1.00	34.55
ATOM	3393	C	THR	120	20.300	30.749	1.943	1.00	32.22
ATOM	3394	O	THR	120	20.341	31.640	2.790	1.00	33.28
ATOM	3395	CB	THR	120	20.957	31.205	-0.399	1.00	33.14
ATOM	3396	OG1	THR	120	21.644	32.412	-0.057	1.00	31.99
ATOM	3397	CG2	THR	120	20.468	31.317	-1.823	1.00	31.97
ATOM	3398	H	THR	120	19.128	32.885	-0.127	1.00	0.00
ATOM	3399	HG1	THR	120	21.164	33.191	-0.368	1.00	0.00
ATOM	3400	N	VAL	121	20.679	29.497	2.181	1.00	29.15
ATOM	3401	CA	VAL	121	21.254	29.085	3.452	1.00	27.82
ATOM	3402	C	VAL	121	22.755	29.234	3.250	1.00	28.37
ATOM	3403	O	VAL	121	23.207	29.538	2.145	1.00	28.69
ATOM	3404	CB	VAL	121	20.902	27.613	3.795	1.00	26.96
ATOM	3405	CG1	VAL	121	21.481	26.673	2.764	1.00	27.49
ATOM	3406	CG2	VAL	121	21.379	27.247	5.196	1.00	24.97
ATOM	3407	H	VAL	121	20.573	28.879	1.433	1.00	0.00
ATOM	3408	N	THR	122	23.532	29.039	4.303	1.00	29.72
ATOM	3409	CA	THR	122	24.969	29.171	4.183	1.00	31.59
ATOM	3410	C	THR	122	25.618	27.802	4.349	1.00	32.19
ATOM	3411	O	THR	122	25.270	27.053	5.269	1.00	32.90
ATOM	3412	CB	THR	122	25.516	30.143	5.246	1.00	33.10
ATOM	3413	OG1	THR	122	24.646	31.280	5.354	1.00	34.19
ATOM	3414	CG2	THR	122	26.904	30.624	4.855	1.00	33.93
ATOM	3415	H	THR	122	23.207	28.833	5.203	1.00	0.00
ATOM	3416	HG1	THR	122	23.766	31.001	5.612	1.00	0.00
ATOM	3417	N	LEU	123	26.515	27.452	3.430	1.00	31.53
ATOM	3418	CA	LEU	123	27.209	26.167	3.496	1.00	31.02
ATOM	3419	C	LEU	123	28.322	26.220	4.548	1.00	31.62
ATOM	3420	O	LEU	123	29.049	27.204	4.661	1.00	32.50
ATOM	3421	CB	LEU	123	27.773	25.771	2.121	1.00	29.42
ATOM	3422	CG	LEU	123	26.790	25.351	1.019	1.00	26.99
ATOM	3423	CD1	LEU	123	27.539	25.158	-0.291	1.00	25.06
ATOM	3424	CD2	LEU	123	26.053	24.076	1.416	1.00	24.67
ATOM	3425	H	LEU	123	26.732	28.064	2.703	1.00	0.00
ATOM	3426	N	PRO	124	28.448	25.164	5.354	1.00	32.64
ATOM	3427	CA	PRO	124	29.466	25.094	6.400	1.00	34.01
ATOM	3428	C	PRO	124	30.865	25.195	5.836	1.00	35.14
ATOM	3429	O	PRO	124	31.122	24.755	4.725	1.00	34.65
ATOM	3430	CB	PRO	124	29.232	23.711	6.998	1.00	33.70
ATOM	3431	CG	PRO	124	28.733	22.933	5.818	1.00	32.32
ATOM	3432	CD	PRO	124	27.740	23.882	5.238	1.00	32.80
ATOM	3433	N	PRO	125	31.782	25.814	6.585	1.00	37.49
ATOM	3434	CA	PRO	125	33.155	25.934	6.103	1.00	39.11
ATOM	3435	C	PRO	125	33.768	24.534	6.072	1.00	40.69
ATOM	3436	O	PRO	125	33.358	23.655	6.828	1.00	39.70
ATOM	3437	CB	PRO	125	33.806	26.813	7.168	1.00	38.93
ATOM	3438	CG	PRO	125	33.057	26.451	8.404	1.00	38.22
ATOM	3439	CD	PRO	125	31.637	26.440	7.907	1.00	38.30
ATOM	3440	N	ALA	126	34.750	24.340	5.202	1.00	43.31
ATOM	3441	CA	ALA	126	35.410	23.048	5.054	1.00	46.91
ATOM	3442	C	ALA	126	35.841	22.416	6.378	1.00	49.80
ATOM	3443	O	ALA	126	35.583	21.238	6.633	1.00	49.92
ATOM	3444	CB	ALA	126	36.606	23.185	4.121	1.00	47.29
ATOM	3445	H	ALA	126	35.003	25.084	4.619	1.00	0.00

97/126

ATOM	3446	N	SER	127	36.471	23.220	7.228	1.00	52.56
ATOM	3447	CA	SER	127	36.965	22.758	8.521	1.00	54.03
ATOM	3448	C	SER	127	35.882	22.529	9.567	1.00	53.77
ATOM	3449	O	SER	127	36.141	21.913	10.604	1.00	54.33
ATOM	3450	CB	SER	127	38.012	23.748	9.062	1.00	55.86
ATOM	3451	OG	SER	127	37.547	25.096	9.042	1.00	55.97
ATOM	3452	H	SER	127	36.613	24.162	7.017	1.00	0.00
ATOM	3453	HG	SER	127	36.899	25.219	9.754	1.00	0.00
ATOM	3454	N	GLU	128	34.667	22.982	9.283	1.00	53.27
ATOM	3455	CA	GLU	128	33.584	22.845	10.242	1.00	52.57
ATOM	3456	C	GLU	128	33.379	21.431	10.738	1.00	51.46
ATOM	3457	O	GLU	128	33.433	20.464	9.974	1.00	51.06
ATOM	3458	CB	GLU	128	32.280	23.412	9.694	1.00	53.36
ATOM	3459	CG	GLU	128	31.271	23.725	10.784	1.00	54.12
ATOM	3460	CD	GLU	128	31.896	24.467	11.957	1.00	53.62
ATOM	3461	OE1	GLU	128	32.412	25.586	11.755	1.00	53.92
ATOM	3462	OE2	GLU	128	31.892	23.916	13.076	1.00	54.19
ATOM	3463	H	GLU	128	34.461	23.358	8.410	1.00	0.00
ATOM	3464	N	THR	129	33.158	21.330	12.039	1.00	50.59
ATOM	3465	CA	THR	129	32.957	20.056	12.697	1.00	50.23
ATOM	3466	C	THR	129	31.897	20.296	13.752	1.00	48.52
ATOM	3467	O	THR	129	32.040	21.174	14.607	1.00	49.08
ATOM	3468	CB	THR	129	34.258	19.566	13.375	1.00	51.98
ATOM	3469	OG1	THR	129	35.310	19.488	12.403	1.00	52.92
ATOM	3470	CG2	THR	129	34.047	18.191	14.005	1.00	53.49
ATOM	3471	H	THR	129	33.075	22.147	12.589	1.00	0.00
ATOM	3472	HG1	THR	129	35.517	20.322	11.951	1.00	0.00
ATOM	3473	N	PHE	130	30.828	19.517	13.687	1.00	45.94
ATOM	3474	CA	PHE	130	29.729	19.646	14.626	1.00	42.95
ATOM	3475	C	PHE	130	29.930	18.670	15.774	1.00	41.42
ATOM	3476	O	PHE	130	29.925	17.448	15.588	1.00	41.86
ATOM	3477	CB	PHE	130	28.408	19.423	13.889	1.00	41.39
ATOM	3478	CG	PHE	130	28.266	20.285	12.672	1.00	39.34
ATOM	3479	CD1	PHE	130	29.033	20.029	11.535	1.00	38.47
ATOM	3480	CD2	PHE	130	27.435	21.400	12.681	1.00	38.73
ATOM	3481	CE1	PHE	130	28.977	20.874	10.429	1.00	38.13
ATOM	3482	CE2	PHE	130	27.375	22.247	11.576	1.00	38.62
ATOM	3483	CZ	PHE	130	28.149	21.985	10.452	1.00	37.77
ATOM	3484	H	PHE	130	30.776	18.819	13.005	1.00	0.00
ATOM	3485	N	PRO	131	30.188	19.205	16.974	1.00	39.65
ATOM	3486	CA	PRO	131	30.415	18.422	18.191	1.00	39.34
ATOM	3487	C	PRO	131	29.215	17.585	18.606	1.00	37.64
ATOM	3488	O	PRO	131	28.074	18.028	18.509	1.00	36.77
ATOM	3489	CB	PRO	131	30.736	19.497	19.230	1.00	40.21
ATOM	3490	CG	PRO	131	29.932	20.666	18.755	1.00	40.85
ATOM	3491	CD	PRO	131	30.192	20.647	17.272	1.00	39.74
ATOM	3492	N	PRO	132	29.466	16.377	19.121	1.00	37.42
ATOM	3493	CA	PRO	132	28.375	15.504	19.550	1.00	37.72
ATOM	3494	C	PRO	132	27.533	16.249	20.565	1.00	38.37
ATOM	3495	O	PRO	132	28.054	17.001	21.398	1.00	38.89
ATOM	3496	CB	PRO	132	29.112	14.327	20.184	1.00	37.73
ATOM	3497	CG	PRO	132	30.364	14.965	20.711	1.00	37.59
ATOM	3498	CD	PRO	132	30.766	15.844	19.563	1.00	37.40
ATOM	3499	N	GLY	133	26.225	16.077	20.479	1.00	39.47
ATOM	3500	CA	GLY	133	25.351	16.763	21.399	1.00	41.19
ATOM	3501	C	GLY	133	24.882	18.096	20.850	1.00	42.36
ATOM	3502	O	GLY	133	23.771	18.519	21.172	1.00	44.14
ATOM	3503	H	GLY	133	25.850	15.490	19.787	1.00	0.00
ATOM	3504	N	MET	134	25.701	18.756	20.029	1.00	41.67
ATOM	3505	CA	MET	134	25.311	20.043	19.455	1.00	41.10
ATOM	3506	C	MET	134	23.939	19.873	18.821	1.00	41.05
ATOM	3507	O	MET	134	23.740	19.000	17.968	1.00	41.93
ATOM	3508	CB	MET	134	26.309	20.505	18.395	1.00	41.54

ATOM	3509	CG	MET	134	25.883	21.760	17.658	1.00	43.25
ATOM	3510	SD	MET	134	27.021	22.197	16.336	1.00	47.72
ATOM	3511	CE	MET	134	27.509	23.857	16.830	1.00	47.53
ATOM	3512	H	MET	134	26.553	18.382	19.728	1.00	0.00
ATOM	3513	N	PRO	135	22.950	20.634	19.302	1.00	39.34
ATOM	3514	CA	PRO	135	21.611	20.507	18.731	1.00	37.12
ATOM	3515	C	PRO	135	21.502	21.224	17.398	1.00	34.98
ATOM	3516	O	PRO	135	21.989	22.345	17.231	1.00	34.48
ATOM	3517	CB	PRO	135	20.730	21.143	19.799	1.00	36.81
ATOM	3518	CG	PRO	135	21.597	22.242	20.312	1.00	39.01
ATOM	3519	CD	PRO	135	22.961	21.584	20.429	1.00	39.13
ATOM	3520	N	CYS	136	20.911	20.537	16.439	1.00	33.50
ATOM	3521	CA	CYS	136	20.695	21.083	15.117	1.00	32.45
ATOM	3522	C	CYS	136	19.210	20.890	14.843	1.00	33.73
ATOM	3523	O	CYS	136	18.495	20.337	15.684	1.00	34.39
ATOM	3524	CB	CYS	136	21.544	20.335	14.098	1.00	30.37
ATOM	3525	SG	CYS	136	23.334	20.503	14.358	1.00	26.22
ATOM	3526	H	CYS	136	20.625	19.625	16.608	1.00	0.00
ATOM	3527	N	TRP	137	18.738	21.344	13.686	1.00	33.94
ATOM	3528	CA	TRP	137	17.324	21.224	13.342	1.00	33.40
ATOM	3529	C	TRP	137	17.145	20.648	11.952	1.00	33.84
ATOM	3530	O	TRP	137	17.884	21.003	11.037	1.00	35.74
ATOM	3531	CB	TRP	137	16.656	22.600	13.352	1.00	33.55
ATOM	3532	CG	TRP	137	16.834	23.404	14.600	1.00	32.89
ATOM	3533	CD1	TRP	137	17.993	23.951	15.072	1.00	32.81
ATOM	3534	CD2	TRP	137	15.809	23.789	15.512	1.00	33.22
ATOM	3535	NE1	TRP	137	17.750	24.657	16.221	1.00	32.46
ATOM	3536	CE2	TRP	137	16.416	24.575	16.515	1.00	32.62
ATOM	3537	CE3	TRP	137	14.431	23.547	15.579	1.00	34.85
ATOM	3538	CZ2	TRP	137	15.696	25.120	17.572	1.00	34.22
ATOM	3539	CZ3	TRP	137	13.709	24.090	16.635	1.00	35.32
ATOM	3540	CH2	TRP	137	14.345	24.869	17.617	1.00	35.81
ATOM	3541	H	TRP	137	19.351	21.782	13.054	1.00	0.00
ATOM	3542	HE1	TRP	137	18.442	25.193	16.667	1.00	0.00
ATOM	3543	N	VAL	138	16.159	19.773	11.796	1.00	34.21
ATOM	3544	CA	VAL	138	15.846	19.179	10.495	1.00	34.78
ATOM	3545	C	VAL	138	14.489	19.779	10.144	1.00	35.19
ATOM	3546	O	VAL	138	13.687	20.056	11.045	1.00	36.78
ATOM	3547	CB	VAL	138	15.679	17.649	10.566	1.00	35.29
ATOM	3548	CG1	VAL	138	15.790	17.049	9.182	1.00	35.55
ATOM	3549	CG2	VAL	138	16.703	17.040	11.485	1.00	37.18
ATOM	3550	H	VAL	138	15.622	19.557	12.586	1.00	0.00
ATOM	3551	N	THR	139	14.216	19.972	8.859	1.00	33.49
ATOM	3552	CA	THR	139	12.941	20.562	8.461	1.00	32.04
ATOM	3553	C	THR	139	12.356	19.855	7.242	1.00	31.06
ATOM	3554	O	THR	139	13.100	19.430	6.354	1.00	31.55
ATOM	3555	CB	THR	139	13.110	22.066	8.140	1.00	32.20
ATOM	3556	OG1	THR	139	14.107	22.641	8.995	1.00	32.70
ATOM	3557	CG2	THR	139	11.811	22.795	8.374	1.00	34.44
ATOM	3558	H	THR	139	14.870	19.715	8.173	1.00	0.00
ATOM	3559	HG1	THR	139	14.890	22.078	8.934	1.00	0.00
ATOM	3560	N	GLY	140	11.030	19.740	7.194	1.00	29.01
ATOM	3561	CA	GLY	140	10.390	19.083	6.064	1.00	26.53
ATOM	3562	C	GLY	140	8.877	19.000	6.153	1.00	24.44
ATOM	3563	O	GLY	140	8.268	19.568	7.051	1.00	26.54
ATOM	3564	H	GLY	140	10.475	20.083	7.932	1.00	0.00
ATOM	3565	N	TRP	141	8.272	18.301	5.200	1.00	21.59
ATOM	3566	CA	TRP	141	6.822	18.122	5.138	1.00	18.01
ATOM	3567	C	TRP	141	6.544	16.627	5.042	1.00	17.35
ATOM	3568	O	TRP	141	5.624	16.201	4.334	1.00	17.29
ATOM	3569	CB	TRP	141	6.256	18.778	3.875	1.00	15.10
ATOM	3570	CG	TRP	141	6.260	20.267	3.834	1.00	13.29
ATOM	3571	CD1	TRP	141	5.328	21.097	4.379	1.00	13.90

79/176

ATOM	3572	CD2	TRP	141	7.169	21.107	3.106	1.00	12.66
ATOM	3573	NE1	TRP	141	5.589	22.399	4.023	1.00	13.85
ATOM	3574	CE2	TRP	141	6.712	22.434	3.244	1.00	11.73
ATOM	3575	CE3	TRP	141	8.318	20.866	2.345	1.00	13.90
ATOM	3576	CZ2	TRP	141	7.360	23.514	2.650	1.00	11.79
ATOM	3577	CZ3	TRP	141	8.968	21.944	1.751	1.00	13.55
ATOM	3578	CH2	TRP	141	8.486	23.250	1.909	1.00	13.61
ATOM	3579	H	TRP	141	8.847	17.848	4.553	1.00	0.00
ATOM	3580	HE1	TRP	141	5.064	23.185	4.278	1.00	0.00
ATOM	3581	N	GLY	142	7.375	15.828	5.699	1.00	16.09
ATOM	3582	CA	GLY	142	7.202	14.392	5.637	1.00	16.14
ATOM	3583	C	GLY	142	6.307	13.802	6.702	1.00	17.47
ATOM	3584	O	GLY	142	5.665	14.520	7.469	1.00	18.32
ATOM	3585	H	GLY	142	8.113	16.160	6.259	1.00	0.00
ATOM	3586	N	ASP	143	6.272	12.475	6.735	1.00	18.35
ATOM	3587	CA	ASP	143	5.479	11.720	7.690	1.00	19.12
ATOM	3588	C	ASP	143	5.818	12.116	9.115	1.00	20.80
ATOM	3589	O	ASP	143	6.978	12.380	9.446	1.00	20.56
ATOM	3590	CB	ASP	143	5.728	10.217	7.527	1.00	19.03
ATOM	3591	CG	ASP	143	5.233	9.673	6.201	1.00	18.70
ATOM	3592	OD1	ASP	143	4.551	10.410	5.448	1.00	19.38
ATOM	3593	OD2	ASP	143	5.529	8.493	5.920	1.00	18.75
ATOM	3594	H	ASP	143	6.807	11.996	6.066	1.00	0.00
ATOM	3595	N	VAL	144	4.800	12.108	9.964	1.00	22.30
ATOM	3596	CA	VAL	144	4.951	12.473	11.358	1.00	23.24
ATOM	3597	C	VAL	144	5.292	11.281	12.236	1.00	25.57
ATOM	3598	O	VAL	144	5.557	11.442	13.426	1.00	26.10
ATOM	3599	CB	VAL	144	3.688	13.143	11.871	1.00	21.79
ATOM	3600	CG1	VAL	144	3.441	14.423	11.094	1.00	21.10
ATOM	3601	CG2	VAL	144	2.509	12.201	11.737	1.00	20.47
ATOM	3602	H	VAL	144	3.953	11.795	9.605	1.00	0.00
ATOM	3603	N	ASP	145	5.271	10.095	11.642	1.00	29.19
ATOM	3604	CA	ASP	145	5.590	8.841	12.325	1.00	34.16
ATOM	3605	C	ASP	145	5.562	7.790	11.220	1.00	36.85
ATOM	3606	O	ASP	145	5.097	8.076	10.114	1.00	38.94
ATOM	3607	CB	ASP	145	4.536	8.513	13.391	1.00	36.58
ATOM	3608	CG	ASP	145	5.024	7.493	14.421	1.00	39.98
ATOM	3609	OD1	ASP	145	5.675	6.493	14.049	1.00	42.07
ATOM	3610	OD2	ASP	145	4.760	7.691	15.624	1.00	41.75
ATOM	3611	H	ASP	145	5.012	10.034	10.696	1.00	0.00
ATOM	3612	N	ASN	146	6.102	6.604	11.484	1.00	37.99
ATOM	3613	CA	ASN	146	6.112	5.531	10.493	1.00	40.65
ATOM	3614	C	ASN	146	4.690	5.290	9.989	1.00	41.93
ATOM	3615	O	ASN	146	3.798	4.951	10.769	1.00	42.73
ATOM	3616	CB	ASN	146	6.684	4.241	11.099	1.00	42.59
ATOM	3617	CG	ASN	146	8.114	4.405	11.593	1.00	44.98
ATOM	3618	OD1	ASN	146	9.078	4.147	10.866	1.00	45.48
ATOM	3619	ND2	ASN	146	8.256	4.858	12.832	1.00	46.50
ATOM	3620	H	ASN	146	6.501	6.482	12.364	1.00	0.00
ATOM	3621	HD21	ASN	146	7.433	5.081	13.338	1.00	0.00
ATOM	3622	HD22	ASN	146	9.151	4.976	13.213	1.00	0.00
ATOM	3623	N	ASP	147	4.483	5.516	8.695	1.00	42.89
ATOM	3624	CA	ASP	147	3.182	5.348	8.051	1.00	43.77
ATOM	3625	C	ASP	147	2.153	6.353	8.526	1.00	43.61
ATOM	3626	O	ASP	147	0.952	6.112	8.441	1.00	45.41
ATOM	3627	CB	ASP	147	2.635	3.929	8.236	1.00	46.19
ATOM	3628	CG	ASP	147	3.266	2.935	7.290	1.00	49.04
ATOM	3629	OD1	ASP	147	3.502	3.289	6.111	1.00	49.80
ATOM	3630	OD2	ASP	147	3.528	1.793	7.727	1.00	50.69
ATOM	3631	H	ASP	147	5.215	5.831	8.129	1.00	0.00
ATOM	3632	N	GLU	149	2.619	7.489	9.017	1.00	42.94
ATOM	3633	CA	GLU	149	1.723	8.527	9.485	1.00	43.32
ATOM	3634	C	GLU	149	1.942	9.752	8.633	1.00	42.86

80/176

ATOM	3635	O	GLU	149	2.821	10.557	8.924	1.00	43.45
ATOM	3636	CB	GLU	149	2.005	8.859	10.942	1.00	45.78
ATOM	3637	CG	GLU	149	1.350	7.925	11.931	1.00	50.19
ATOM	3638	CD	GLU	149	0.491	8.671	12.933	1.00	52.83
ATOM	3639	OE1	GLU	149	-0.392	9.447	12.497	1.00	55.40
ATOM	3640	OE2	GLU	149	0.695	8.488	14.153	1.00	54.00
ATOM	3641	H	GLU	149	3.580	7.654	9.060	1.00	0.00
ATOM	3642	N	ARG	150	1.172	9.876	7.559	1.00	41.94
ATOM	3643	CA	ARG	150	1.294	11.020	6.663	1.00	41.29
ATOM	3644	C	ARG	150	1.051	12.332	7.400	1.00	37.71
ATOM	3645	O	ARG	150	0.392	12.358	8.443	1.00	37.36
ATOM	3646	CB	ARG	150	0.284	10.927	5.514	1.00	45.83
ATOM	3647	CG	ARG	150	0.716	10.127	4.294	1.00	51.41
ATOM	3648	CD	ARG	150	-0.297	10.305	3.142	1.00	56.94
ATOM	3649	NE	ARG	150	-0.309	11.664	2.578	1.00	61.35
ATOM	3650	CZ	ARG	150	-1.307	12.545	2.711	1.00	63.02
ATOM	3651	NH1	ARG	150	-2.406	12.229	3.396	1.00	63.70
ATOM	3652	NH2	ARG	150	-1.203	13.749	2.151	1.00	62.91
ATOM	3653	H	ARG	150	0.511	9.174	7.402	1.00	0.00
ATOM	3654	HE	ARG	150	0.500	11.913	2.079	1.00	0.00
ATOM	3655	HH11	ARG	150	-2.497	11.328	3.827	1.00	0.00
ATOM	3656	HH12	ARG	150	-3.179	12.853	3.521	1.00	0.00
ATOM	3657	HH21	ARG	150	-0.397	14.023	1.608	1.00	0.00
ATOM	3658	HH22	ARG	150	-1.919	14.441	2.229	1.00	0.00
ATOM	3659	N	LEU	151	1.606	13.412	6.862	1.00	33.58
ATOM	3660	CA	LEU	151	1.415	14.738	7.434	1.00	30.33
ATOM	3661	C	LEU	151	0.016	15.146	6.998	1.00	29.75
ATOM	3662	O	LEU	151	-0.240	15.359	5.810	1.00	32.33
ATOM	3663	CB	LEU	151	2.438	15.718	6.857	1.00	29.57
ATOM	3664	CG	LEU	151	2.288	17.196	7.227	1.00	28.37
ATOM	3665	CD1	LEU	151	2.698	17.417	8.671	1.00	27.54
ATOM	3666	CD2	LEU	151	3.136	18.049	6.295	1.00	27.57
ATOM	3667	H	LEU	151	2.183	13.304	6.079	1.00	0.00
ATOM	3668	N	PRO	152	-0.920	15.231	7.942	1.00	27.48
ATOM	3669	CA	PRO	152	-2.289	15.612	7.600	1.00	25.97
ATOM	3670	C	PRO	152	-2.425	17.049	7.100	1.00	24.76
ATOM	3671	O	PRO	152	-1.610	17.920	7.428	1.00	25.13
ATOM	3672	CB	PRO	152	-3.017	15.430	8.925	1.00	26.39
ATOM	3673	CG	PRO	152	-1.977	15.825	9.910	1.00	27.66
ATOM	3674	CD	PRO	152	-0.765	15.087	9.397	1.00	27.22
ATOM	3675	N	PRO	152A	-3.424	17.304	6.240	1.00	22.89
ATOM	3676	CA	PRO	152A	-3.642	18.656	5.717	1.00	21.45
ATOM	3677	C	PRO	152A	-4.019	19.579	6.878	1.00	20.40
ATOM	3678	O	PRO	152A	-4.628	19.136	7.848	1.00	21.48
ATOM	3679	CB	PRO	152A	-4.802	18.457	4.740	1.00	20.23
ATOM	3680	CG	PRO	152A	-5.485	17.221	5.235	1.00	20.11
ATOM	3681	CD	PRO	152A	-4.342	16.343	5.610	1.00	21.47
ATOM	3682	N	PRO	152B	-3.627	20.861	6.822	1.00	19.54
ATOM	3683	CA	PRO	152B	-3.130	21.633	5.682	1.00	20.04
ATOM	3684	C	PRO	152B	-1.614	21.535	5.424	1.00	20.39
ATOM	3685	O	PRO	152B	-0.980	22.533	5.054	1.00	20.71
ATOM	3686	CB	PRO	152B	-3.534	23.053	6.059	1.00	19.55
ATOM	3687	CG	PRO	152B	-3.275	23.066	7.514	1.00	17.27
ATOM	3688	CD	PRO	152B	-3.874	21.753	7.969	1.00	18.19
ATOM	3689	N	PHE	153	-1.031	20.366	5.682	1.00	18.32
ATOM	3690	CA	PHE	153	0.389	20.120	5.440	1.00	16.85
ATOM	3691	C	PHE	153	1.321	21.248	5.902	1.00	17.00
ATOM	3692	O	PHE	153	2.023	21.860	5.090	1.00	16.84
ATOM	3693	CB	PHE	153	0.627	19.895	3.948	1.00	14.47
ATOM	3694	CG	PHE	153	-0.486	19.194	3.245	1.00	12.59
ATOM	3695	CD1	PHE	153	-1.423	19.921	2.521	1.00	11.93
ATOM	3696	CD2	PHE	153	-0.575	17.811	3.262	1.00	12.66
ATOM	3697	CE1	PHE	153	-2.429	19.281	1.819	1.00	11.58

81/176

ATOM	3698	CE2	PHE	153	-1.582	17.157	2.560	1.00	12.96
ATOM	3699	CZ	PHE	153	-2.511	17.893	1.836	1.00	12.43
ATOM	3700	H	PHE	153	-1.498	19.621	6.101	1.00	0.00
ATOM	3701	N	PRO	154	1.349	21.535	7.205	1.00	16.98
ATOM	3702	CA	PRO	154	2.224	22.607	7.685	1.00	18.46
ATOM	3703	C	PRO	154	3.683	22.166	7.675	1.00	20.76
ATOM	3704	O	PRO	154	3.964	20.976	7.796	1.00	23.06
ATOM	3705	CB	PRO	154	1.728	22.814	9.106	1.00	18.11
ATOM	3706	CG	PRO	154	1.398	21.404	9.538	1.00	17.22
ATOM	3707	CD	PRO	154	0.690	20.838	8.325	1.00	17.21
ATOM	3708	N	LEU	155	4.607	23.107	7.498	1.00	20.75
ATOM	3709	CA	LEU	155	6.033	22.778	7.515	1.00	20.02
ATOM	3710	C	LEU	155	6.431	22.537	8.969	1.00	20.39
ATOM	3711	O	LEU	155	6.289	23.429	9.804	1.00	22.00
ATOM	3712	CB	LEU	155	6.866	23.928	6.937	1.00	19.71
ATOM	3713	CG	LEU	155	8.395	23.890	7.113	1.00	18.62
ATOM	3714	CD1	LEU	155	8.985	22.667	6.439	1.00	18.68
ATOM	3715	CD2	LEU	155	9.010	25.157	6.533	1.00	17.30
ATOM	3716	H	LEU	155	4.308	24.025	7.345	1.00	0.00
ATOM	3717	N	LYS	156	6.916	21.337	9.270	1.00	18.99
ATOM	3718	CA	LYS	156	7.325	21.000	10.629	1.00	17.90
ATOM	3719	C	LYS	156	8.836	21.054	10.807	1.00	17.45
ATOM	3720	O	LYS	156	9.592	21.000	9.835	1.00	16.87
ATOM	3721	CB	LYS	156	6.798	19.621	11.038	1.00	17.74
ATOM	3722	CG	LYS	156	5.309	19.576	11.352	1.00	16.80
ATOM	3723	CD	LYS	156	4.890	18.182	11.785	1.00	18.08
ATOM	3724	CE	LYS	156	5.505	17.784	13.128	1.00	20.35
ATOM	3725	NZ	LYS	156	5.344	16.329	13.460	1.00	20.97
ATOM	3726	H	LYS	156	7.078	20.679	8.560	1.00	0.00
ATOM	3727	HZ1	LYS	156	5.941	15.757	12.818	1.00	0.00
ATOM	3728	HZ2	LYS	156	4.359	16.030	13.364	1.00	0.00
ATOM	3729	HZ3	LYS	156	5.642	16.084	14.426	1.00	0.00
ATOM	3730	N	GLN	157	9.258	21.123	12.067	1.00	18.39
ATOM	3731	CA	GLN	157	10.664	21.210	12.450	1.00	19.27
ATOM	3732	C	GLN	157	10.870	20.453	13.758	1.00	20.05
ATOM	3733	O	GLN	157	9.923	20.256	14.517	1.00	20.91
ATOM	3734	CB	GLN	157	11.018	22.675	12.712	1.00	19.96
ATOM	3735	CG	GLN	157	10.229	23.272	13.895	1.00	19.36
ATOM	3736	CD	GLN	157	10.516	24.742	14.160	1.00	20.05
ATOM	3737	OE1	GLN	157	10.802	25.522	13.242	1.00	20.12
ATOM	3738	NE2	GLN	157	10.418	25.132	15.420	1.00	19.86
ATOM	3739	H	GLN	157	8.590	21.162	12.782	1.00	0.00
ATOM	3740	HE21	GLN	157	10.162	24.470	16.090	1.00	0.00
ATOM	3741	HE22	GLN	157	10.606	26.072	15.608	1.00	0.00
ATOM	3742	N	VAL	158	12.110	20.076	14.044	1.00	19.79
ATOM	3743	CA	VAL	158	12.424	19.388	15.286	1.00	19.85
ATOM	3744	C	VAL	158	13.897	19.544	15.617	1.00	22.43
ATOM	3745	O	VAL	158	14.737	19.550	14.716	1.00	24.62
ATOM	3746	CB	VAL	158	12.078	17.898	15.224	1.00	18.99
ATOM	3747	CG1	VAL	158	12.969	17.169	14.239	1.00	19.16
ATOM	3748	CG2	VAL	158	12.218	17.303	16.587	1.00	20.14
ATOM	3749	H	VAL	158	12.819	20.239	13.382	1.00	0.00
ATOM	3750	N	LYS	159	14.206	19.729	16.896	1.00	24.32
ATOM	3751	CA	LYS	159	15.596	19.870	17.318	1.00	26.22
ATOM	3752	C	LYS	159	16.181	18.476	17.484	1.00	26.66
ATOM	3753	O	LYS	159	15.661	17.669	18.256	1.00	27.72
ATOM	3754	CB	LYS	159	15.702	20.640	18.640	1.00	28.05
ATOM	3755	CG	LYS	159	17.143	20.892	19.093	1.00	30.96
ATOM	3756	CD	LYS	159	17.236	21.509	20.494	1.00	33.80
ATOM	3757	CE	LYS	159	16.838	22.992	20.539	1.00	35.50
ATOM	3758	NZ	LYS	159	17.792	23.911	19.836	1.00	36.76
ATOM	3759	H	LYS	159	13.474	19.763	17.547	1.00	0.00
ATOM	3760	HZ1	LYS	159	17.817	23.689	18.819	1.00	0.00

ATOM	3761	HZ2	LYS	159	18.746	23.834	20.239	1.00	0.00
ATOM	3762	HZ3	LYS	159	17.456	24.891	19.940	1.00	0.00
ATOM	3763	N	VAL	160	17.252	18.192	16.756	1.00	25.77
ATOM	3764	CA	VAL	160	17.894	16.890	16.820	1.00	25.19
ATOM	3765	C	VAL	160	19.331	17.005	17.307	1.00	24.85
ATOM	3766	O	VAL	160	20.053	17.922	16.917	1.00	24.58
ATOM	3767	CB	VAL	160	17.892	16.190	15.441	1.00	25.80
ATOM	3768	CG1	VAL	160	16.480	15.826	15.039	1.00	26.37
ATOM	3769	CG2	VAL	160	18.531	17.086	14.391	1.00	24.77
ATOM	3770	H	VAL	160	17.623	18.884	16.195	1.00	0.00
ATOM	3771	N	PRO	161	19.736	16.116	18.230	1.00	24.60
ATOM	3772	CA	PRO	161	21.093	16.101	18.783	1.00	23.63
ATOM	3773	C	PRO	161	22.051	15.391	17.833	1.00	23.67
ATOM	3774	O	PRO	161	21.764	14.277	17.407	1.00	23.91
ATOM	3775	CB	PRO	161	20.911	15.303	20.071	1.00	23.61
ATOM	3776	CG	PRO	161	19.834	14.326	19.709	1.00	21.45
ATOM	3777	CD	PRO	161	18.854	15.205	18.989	1.00	23.62
ATOM	3778	N	ILE	162	23.145	16.052	17.460	1.00	24.01
ATOM	3779	CA	ILE	162	24.147	15.457	16.564	1.00	24.35
ATOM	3780	C	ILE	162	24.814	14.283	17.270	1.00	26.36
ATOM	3781	O	ILE	162	25.017	14.314	18.485	1.00	28.28
ATOM	3782	CB	ILE	162	25.265	16.471	16.180	1.00	22.68
ATOM	3783	CG1	ILE	162	24.772	17.459	15.128	1.00	22.47
ATOM	3784	CG2	ILE	162	26.488	15.748	15.635	1.00	22.99
ATOM	3785	H	ILE	162	23.295	16.977	17.753	1.00	0.00
ATOM	3786	CD	ILE	162	24.562	16.840	13.773	1.00	23.92
ATOM	3787	N	MET	163	25.171	13.259	16.508	1.00	26.92
ATOM	3788	CA	MET	163	25.835	12.096	17.071	1.00	27.14
ATOM	3789	C	MET	163	27.113	11.847	16.294	1.00	26.70
ATOM	3790	O	MET	163	27.169	12.043	15.080	1.00	26.56
ATOM	3791	CB	MET	163	24.935	10.863	17.018	1.00	28.49
ATOM	3792	CG	MET	163	25.540	9.660	17.706	1.00	32.12
ATOM	3793	SD	MET	163	24.403	8.288	17.898	1.00	35.49
ATOM	3794	CE	MET	163	23.078	9.094	18.802	1.00	36.50
ATOM	3795	H	MET	163	25.009	13.295	15.549	1.00	0.00
ATOM	3796	N	GLU	164	28.147	11.441	17.016	1.00	26.10
ATOM	3797	CA	GLU	164	29.447	11.168	16.437	1.00	25.57
ATOM	3798	C	GLU	164	29.351	9.860	15.650	1.00	24.91
ATOM	3799	O	GLU	164	28.704	8.910	16.101	1.00	24.54
ATOM	3800	CB	GLU	164	30.464	11.078	17.574	1.00	26.32
ATOM	3801	CG	GLU	164	31.889	11.396	17.193	1.00	27.94
ATOM	3802	CD	GLU	164	32.647	10.184	16.731	1.00	29.60
ATOM	3803	OE1	GLU	164	32.110	9.066	16.859	1.00	30.62
ATOM	3804	OE2	GLU	164	33.787	10.340	16.245	1.00	31.23
ATOM	3805	H	GLU	164	28.029	11.296	17.974	1.00	0.00
ATOM	3806	N	ASN	165	29.965	9.826	14.467	1.00	24.44
ATOM	3807	CA	ASN	165	29.936	8.643	13.598	1.00	23.80
ATOM	3808	C	ASN	165	30.196	7.323	14.314	1.00	25.34
ATOM	3809	O	ASN	165	29.352	6.441	14.297	1.00	24.57
ATOM	3810	CB	ASN	165	30.925	8.779	12.427	1.00	21.73
ATOM	3811	CG	ASN	165	30.386	9.630	11.280	1.00	19.60
ATOM	3812	OD1	ASN	165	29.701	10.625	11.497	1.00	18.77
ATOM	3813	ND2	ASN	165	30.725	9.255	10.056	1.00	17.38
ATOM	3814	H	ASN	165	30.458	10.612	14.157	1.00	0.00
ATOM	3815	HD21	ASN	165	31.292	8.468	9.911	1.00	0.00
ATOM	3816	HD22	ASN	165	30.350	9.786	9.318	1.00	0.00
ATOM	3817	N	HIS	166	31.339	7.210	14.985	1.00	29.08
ATOM	3818	CA	HIS	166	31.720	5.981	15.690	1.00	31.78
ATOM	3819	C	HIS	166	30.678	5.492	16.683	1.00	30.56
ATOM	3820	O	HIS	166	30.415	4.291	16.779	1.00	29.97
ATOM	3821	CB	HIS	166	33.062	6.161	16.396	1.00	37.52
ATOM	3822	CG	HIS	166	34.184	6.513	15.470	1.00	44.81
ATOM	3823	ND1	HIS	166	34.720	7.781	15.397	1.00	48.34

83/176

ATOM	3824	CD2	HIS	166	34.864	5.767	14.566	1.00	47.83
ATOM	3825	CE1	HIS	166	35.678	7.805	14.487	1.00	50.35
ATOM	3826	NE2	HIS	166	35.786	6.593	13.968	1.00	50.40
ATOM	3827	H	HIS	166	31.909	8.003	15.080	1.00	0.00
ATOM	3828	HD1	HIS	166	34.436	8.547	15.962	1.00	0.00
ATOM	3829	HE2	HIS	166	36.430	6.307	13.297	1.00	0.00
ATOM	3830	N	ILE	167	30.099	6.420	17.433	1.00	29.81
ATOM	3831	CA	ILE	167	29.069	6.066	18.406	1.00	28.28
ATOM	3832	C	ILE	167	27.817	5.604	17.659	1.00	28.58
ATOM	3833	O	ILE	167	27.121	4.671	18.084	1.00	29.23
ATOM	3834	CB	ILE	167	28.745	7.267	19.319	1.00	25.29
ATOM	3835	CG1	ILE	167	29.918	7.516	20.263	1.00	22.49
ATOM	3836	CG2	ILE	167	27.474	7.024	20.102	1.00	25.92
ATOM	3837	H	ILE	167	30.420	7.343	17.333	1.00	0.00
ATOM	3838	CD	ILE	167	30.225	6.346	21.150	1.00	19.13
ATOM	3839	N	CYS	168	27.572	6.238	16.517	1.00	27.21
ATOM	3840	CA	CYS	168	26.420	5.936	15.681	1.00	24.91
ATOM	3841	C	CYS	168	26.536	4.595	14.978	1.00	23.89
ATOM	3842	O	CYS	168	25.588	3.816	14.953	1.00	24.59
ATOM	3843	CB	CYS	168	26.237	7.037	14.652	1.00	23.00
ATOM	3844	SG	CYS	168	24.641	6.989	13.801	1.00	19.58
ATOM	3845	H	CYS	168	28.172	6.967	16.256	1.00	0.00
ATOM	3846	N	ASP	169	27.695	4.332	14.395	1.00	22.73
ATOM	3847	CA	ASP	169	27.928	3.078	13.705	1.00	22.97
ATOM	3848	C	ASP	169	27.700	1.939	14.700	1.00	23.84
ATOM	3849	O	ASP	169	27.077	0.923	14.373	1.00	24.60
ATOM	3850	CB	ASP	169	29.353	3.045	13.156	1.00	23.86
ATOM	3851	CG	ASP	169	29.576	1.912	12.182	1.00	26.51
ATOM	3852	OD1	ASP	169	28.592	1.453	11.569	1.00	27.87
ATOM	3853	OD2	ASP	169	30.736	1.476	12.016	1.00	28.55
ATOM	3854	H	ASP	169	28.392	4.986	14.412	1.00	0.00
ATOM	3855	N	ALA	170	28.142	2.159	15.937	1.00	23.68
ATOM	3856	CA	ALA	170	27.997	1.193	17.024	1.00	22.37
ATOM	3857	C	ALA	170	26.545	0.776	17.184	1.00	20.80
ATOM	3858	O	ALA	170	26.236	-0.395	17.386	1.00	21.39
ATOM	3859	CB	ALA	170	28.499	1.796	18.322	1.00	23.79
ATOM	3860	H	ALA	170	28.622	2.995	16.114	1.00	0.00
ATOM	3861	N	LYS	171	25.654	1.745	17.063	1.00	19.15
ATOM	3862	CA	LYS	171	24.233	1.492	17.191	1.00	20.10
ATOM	3863	C	LYS	171	23.716	0.607	16.055	1.00	19.94
ATOM	3864	O	LYS	171	22.983	-0.355	16.294	1.00	20.69
ATOM	3865	CB	LYS	171	23.480	2.822	17.203	1.00	21.21
ATOM	3866	CG	LYS	171	24.150	3.881	18.062	1.00	21.17
ATOM	3867	CD	LYS	171	23.824	3.698	19.517	1.00	21.72
ATOM	3868	CE	LYS	171	22.585	4.481	19.862	1.00	22.89
ATOM	3869	NZ	LYS	171	22.867	5.945	19.819	1.00	23.93
ATOM	3870	H	LYS	171	25.990	2.650	16.890	1.00	0.00
ATOM	3871	HZ1	LYS	171	23.249	6.252	18.902	1.00	0.00
ATOM	3872	HZ2	LYS	171	23.579	6.142	20.560	1.00	0.00
ATOM	3873	HZ3	LYS	171	22.024	6.494	20.069	1.00	0.00
ATOM	3874	N	TYR	172	24.122	0.908	14.825	1.00	19.08
ATOM	3875	CA	TYR	172	23.658	0.135	13.678	1.00	19.28
ATOM	3876	C	TYR	172	24.064	-1.322	13.712	1.00	21.15
ATOM	3877	O	TYR	172	23.418	-2.172	13.092	1.00	22.03
ATOM	3878	CB	TYR	172	24.045	0.797	12.358	1.00	17.33
ATOM	3879	CG	TYR	172	23.017	1.813	11.915	1.00	16.92
ATOM	3880	CD1	TYR	172	22.956	3.073	12.506	1.00	17.60
ATOM	3881	CD2	TYR	172	22.078	1.505	10.935	1.00	16.62
ATOM	3882	CE1	TYR	172	21.986	3.999	12.136	1.00	16.87
ATOM	3883	CE2	TYR	172	21.109	2.423	10.560	1.00	17.13
ATOM	3884	CZ	TYR	172	21.070	3.669	11.166	1.00	17.08
ATOM	3885	OH	TYR	172	20.119	4.589	10.795	1.00	18.81
ATOM	3886	H	TYR	172	24.723	1.676	14.705	1.00	0.00

84/126

ATOM	3887	HH	TYR	172	19.627	4.211	10.073	1.00	0.00
ATOM	3888	N	HIS	173	25.137	-1.617	14.432	1.00	21.59
ATOM	3889	CA	HIS	173	25.570	-2.996	14.573	1.00	22.42
ATOM	3890	C	HIS	173	24.785	-3.636	15.708	1.00	24.81
ATOM	3891	O	HIS	173	24.507	-4.838	15.684	1.00	25.91
ATOM	3892	CB	HIS	173	27.062	-3.061	14.859	1.00	20.46
ATOM	3893	CG	HIS	173	27.899	-2.671	13.691	1.00	18.20
ATOM	3894	ND1	HIS	173	28.356	-3.585	12.769	1.00	17.81
ATOM	3895	CD2	HIS	173	28.323	-1.458	13.267	1.00	18.07
ATOM	3896	CE1	HIS	173	29.022	-2.949	11.822	1.00	18.52
ATOM	3897	NE2	HIS	173	29.019	-1.659	12.102	1.00	18.15
ATOM	3898	H	HIS	173	25.644	-0.875	14.824	1.00	0.00
ATOM	3899	HD1	HIS	173	28.234	-4.564	12.830	1.00	0.00
ATOM	3900	HE2	HIS	173	29.511	-0.946	11.624	1.00	0.00
ATOM	3901	N	LEU	173A	24.384	-2.813	16.674	1.00	26.04
ATOM	3902	CA	LEU	173A	23.630	-3.273	17.832	1.00	27.52
ATOM	3903	C	LEU	173A	22.260	-3.809	17.431	1.00	27.26
ATOM	3904	O	LEU	173A	21.342	-3.044	17.133	1.00	28.04
ATOM	3905	CB	LEU	173A	23.485	-2.137	18.845	1.00	31.03
ATOM	3906	CG	LEU	173A	23.502	-2.536	20.326	1.00	34.64
ATOM	3907	CD1	LEU	173A	23.961	-1.346	21.165	1.00	35.28
ATOM	3908	CD2	LEU	173A	22.132	-3.068	20.791	1.00	36.09
ATOM	3909	H	LEU	173A	24.608	-1.858	16.631	1.00	0.00
ATOM	3910	N	GLY	173B	22.139	-5.132	17.416	1.00	26.76
ATOM	3911	CA	GLY	173B	20.891	-5.769	17.046	1.00	26.34
ATOM	3912	C	GLY	173B	20.935	-6.315	15.632	1.00	26.87
ATOM	3913	O	GLY	173B	19.925	-6.783	15.107	1.00	27.77
ATOM	3914	H	GLY	173B	22.933	-5.677	17.604	1.00	0.00
ATOM	3915	N	ALA	173C	22.116	-6.301	15.028	1.00	26.46
ATOM	3916	CA	ALA	173C	22.281	-6.777	13.666	1.00	27.18
ATOM	3917	C	ALA	173C	23.362	-7.849	13.583	1.00	28.08
ATOM	3918	O	ALA	173C	24.112	-8.057	14.534	1.00	30.04
ATOM	3919	CB	ALA	173C	22.623	-5.605	12.760	1.00	27.71
ATOM	3920	H	ALA	173C	22.935	-5.987	15.464	1.00	0.00
ATOM	3921	N	TYR	173D	23.430	-8.536	12.447	1.00	27.96
ATOM	3922	CA	TYR	173D	24.422	-9.588	12.237	1.00	27.77
ATOM	3923	C	TYR	173D	25.723	-9.049	11.653	1.00	26.96

ATOM	2438	HZ3	LYS	26	13.919	31.686	16.012	1.00	0.00
ATOM	2439	N	TRP	27	12.642	29.272	8.099	1.00	30.07
ATOM	2440	CA	TRP	27	13.527	28.493	7.250	1.00	26.81
ATOM	2441	C	TRP	27	13.280	28.935	5.817	1.00	26.48
ATOM	2442	O	TRP	27	12.693	28.212	5.022	1.00	26.57
ATOM	2443	CB	TRP	27	13.235	27.001	7.430	1.00	24.02
ATOM	2444	CG	TRP	27	13.038	26.596	8.866	1.00	20.50
ATOM	2445	CD1	TRP	27	11.860	26.266	9.461	1.00	21.21
ATOM	2446	CD2	TRP	27	14.045	26.475	9.880	1.00	19.98
ATOM	2447	NE1	TRP	27	12.064	25.943	10.782	1.00	19.35
ATOM	2448	CE2	TRP	27	13.395	26.059	11.066	1.00	18.90
ATOM	2449	CE3	TRP	27	15.431	26.676	9.905	1.00	19.98
ATOM	2450	CZ2	TRP	27	14.081	25.837	12.260	1.00	17.99
ATOM	2451	CZ3	TRP	27	16.116	26.458	11.096	1.00	19.13
ATOM	2452	CH2	TRP	27	15.437	26.039	12.257	1.00	19.26
ATOM	2453	H	TRP	27	11.727	29.436	7.831	1.00	0.00
ATOM	2454	HE1	TRP	27	11.390	25.696	11.450	1.00	0.00
ATOM	2455	N	PRO	28	13.751	30.134	5.463	1.00	26.55
ATOM	2456	CA	PRO	28	13.587	30.706	4.123	1.00	26.76
ATOM	2457	C	PRO	28	14.279	29.954	3.000	1.00	26.36
ATOM	2458	O	PRO	28	14.131	30.321	1.837	1.00	27.58
ATOM	2459	CB	PRO	28	14.165	32.111	4.282	1.00	26.65
ATOM	2460	CG	PRO	28	15.250	31.902	5.278	1.00	27.42
ATOM	2461	CD	PRO	28	14.581	31.011	6.304	1.00	26.84
ATOM	2462	N	TRP	29	15.035	28.916	3.345	1.00	25.45
ATOM	2463	CA	TRP	29	15.750	28.129	2.341	1.00	25.13
ATOM	2464	C	TRP	29	15.098	26.789	1.994	1.00	24.78
ATOM	2465	O	TRP	29	15.530	26.120	1.049	1.00	25.95
ATOM	2466	CB	TRP	29	17.194	27.884	2.784	1.00	24.26
ATOM	2467	CG	TRP	29	17.310	27.230	4.132	1.00	22.84
ATOM	2468	CD1	TRP	29	17.081	25.915	4.435	1.00	22.16
ATOM	2469	CD2	TRP	29	17.669	27.869	5.360	1.00	22.18
ATOM	2470	NE1	TRP	29	17.270	25.701	5.776	1.00	22.28
ATOM	2471	CE2	TRP	29	17.632	26.882	6.370	1.00	22.66
ATOM	2472	CE3	TRP	29	18.021	29.182	5.706	1.00	20.83
ATOM	2473	CZ2	TRP	29	17.930	27.167	7.704	1.00	22.91
ATOM	2474	CZ3	TRP	29	18.317	29.467	7.030	1.00	20.78
ATOM	2475	CH2	TRP	29	18.269	28.462	8.014	1.00	23.06
ATOM	2476	H	TRP	29	15.119	28.665	4.279	1.00	0.00
ATOM	2477	HE1	TRP	29	17.126	24.846	6.245	1.00	0.00
ATOM	2478	N	GLN	30	14.087	26.395	2.770	1.00	22.56
ATOM	2479	CA	GLN	30	13.378	25.132	2.569	1.00	19.79
ATOM	2480	C	GLN	30	12.780	25.071	1.168	1.00	19.70
ATOM	2481	O	GLN	30	12.359	26.096	0.617	1.00	21.33
ATOM	2482	CB	GLN	30	12.277	24.981	3.621	1.00	18.14
ATOM	2483	CG	GLN	30	11.552	23.651	3.602	1.00	16.12
ATOM	2484	CD	GLN	30	12.447	22.491	3.952	1.00	14.29
ATOM	2485	OE1	GLN	30	12.496	21.497	3.231	1.00	15.76
ATOM	2486	NE2	GLN	30	13.159	22.604	5.063	1.00	11.06
ATOM	2487	H	GLN	30	13.745	26.996	3.457	1.00	0.00
ATOM	2488	HE21	GLN	30	13.100	23.413	5.605	1.00	0.00
ATOM	2489	HE22	GLN	30	13.720	21.832	5.270	1.00	0.00
ATOM	2490	N	VAL	31	12.759	23.876	0.592	1.00	18.32
ATOM	2491	CA	VAL	31	12.228	23.678	-0.750	1.00	17.12
ATOM	2492	C	VAL	31	11.439	22.375	-0.845	1.00	16.16
ATOM	2493	O	VAL	31	11.690	21.430	-0.092	1.00	16.44
ATOM	2494	CB	VAL	31	13.375	23.690	-1.799	1.00	16.99
ATOM	2495	CG1	VAL	31	12.932	23.065	-3.107	1.00	17.45
ATOM	2496	CG2	VAL	31	13.832	25.119	-2.052	1.00	18.64
ATOM	2497	H	VAL	31	13.122	23.086	1.052	1.00	0.00
ATOM	2498	N	SER	32	10.445	22.367	-1.728	1.00	14.09
ATOM	2499	CA	SER	32	9.609	21.205	-1.971	1.00	13.42
ATOM	2500	C	SER	32	9.792	20.816	-3.428	1.00	13.80

ATOM	2501	O	SER	32	9.605	21.649	-4.313	1.00	15.20
ATOM	2502	CB	SER	32	8.141	21.544	-1.716	1.00	13.19
ATOM	2503	OG	SER	32	7.288	20.484	-2.125	1.00	12.32
ATOM	2504	H	SER	32	10.255	23.191	-2.219	1.00	0.00
ATOM	2505	HG	SER	32	6.372	20.719	-1.909	1.00	0.00
ATOM	2506	N	LEU	33	10.233	19.585	-3.667	1.00	13.20
ATOM	2507	CA	LEU	33	10.428	19.085	-5.020	1.00	13.21
ATOM	2508	C	LEU	33	9.149	18.369	-5.394	1.00	15.47
ATOM	2509	O	LEU	33	8.661	17.535	-4.622	1.00	16.81
ATOM	2510	CB	LEU	33	11.604	18.111	-5.085	1.00	12.12
ATOM	2511	CG	LEU	33	13.004	18.616	-4.739	1.00	11.95
ATOM	2512	CD1	LEU	33	14.048	17.626	-5.256	1.00	10.82
ATOM	2513	CD2	LEU	33	13.227	19.984	-5.353	1.00	11.27
ATOM	2514	H	LEU	33	10.429	19.005	-2.915	1.00	0.00
ATOM	2515	N	ARG	34	8.618	18.671	-6.575	1.00	16.91
ATOM	2516	CA	ARG	34	7.370	18.069	-7.031	1.00	19.06
ATOM	2517	C	ARG	34	7.516	17.201	-8.280	1.00	21.65
ATOM	2518	O	ARG	34	8.478	17.342	-9.036	1.00	23.43
ATOM	2519	CB	ARG	34	6.354	19.167	-7.340	1.00	17.58
ATOM	2520	CG	ARG	34	6.261	20.267	-6.318	1.00	16.22
ATOM	2521	CD	ARG	34	5.594	19.814	-5.036	1.00	16.92
ATOM	2522	NE	ARG	34	5.360	20.971	-4.173	1.00	18.23
ATOM	2523	CZ	ARG	34	4.220	21.660	-4.115	1.00	17.31
ATOM	2524	NH1	ARG	34	3.171	21.309	-4.854	1.00	16.04
ATOM	2525	NH2	ARG	34	4.132	22.717	-3.315	1.00	18.61
ATOM	2526	H	ARG	34	9.083	19.302	-7.162	1.00	0.00
ATOM	2527	HE	ARG	34	6.127	21.197	-3.616	1.00	0.00
ATOM	2528	HH11	ARG	34	3.136	20.499	-5.443	1.00	0.00
ATOM	2529	HH12	ARG	34	2.344	21.904	-4.839	1.00	0.00
ATOM	2530	HH21	ARG	34	4.824	23.118	-2.714	1.00	0.00
ATOM	2531	HH22	ARG	34	3.269	23.270	-3.296	1.00	0.00
ATOM	2532	N	VAL	35	6.544	16.311	-8.485	1.00	23.39
ATOM	2533	CA	VAL	35	6.487	15.439	-9.656	1.00	25.24
ATOM	2534	C	VAL	35	5.079	15.486	-10.208	1.00	29.75
ATOM	2535	O	VAL	35	4.102	15.568	-9.451	1.00	29.19
ATOM	2536	CB	VAL	35	6.809	13.970	-9.354	1.00	22.92
ATOM	2537	CG1	VAL	35	8.289	13.756	-9.358	1.00	24.74
ATOM	2538	CG2	VAL	35	6.200	13.546	-8.039	1.00	22.83
ATOM	2539	H	VAL	35	5.841	16.248	-7.804	1.00	0.00
ATOM	2540	N	HIS	36	4.992	15.403	-11.532	1.00	34.90
ATOM	2541	CA	HIS	36	3.728	15.445	-12.251	1.00	39.85
ATOM	2542	C	HIS	36	2.504	14.880	-11.533	1.00	40.09
ATOM	2543	O	HIS	36	1.666	15.649	-11.079	1.00	42.12
ATOM	2544	CB	HIS	36	3.873	14.865	-13.670	1.00	48.03
ATOM	2545	CG	HIS	36	4.247	13.407	-13.722	1.00	56.59
ATOM	2546	ND1	HIS	36	5.437	12.911	-13.226	1.00	59.53
ATOM	2547	CD2	HIS	36	3.598	12.344	-14.263	1.00	59.06
ATOM	2548	CE1	HIS	36	5.505	11.611	-13.459	1.00	60.32
ATOM	2549	NE2	HIS	36	4.403	11.243	-14.088	1.00	60.67
ATOM	2550	H	HIS	36	5.840	15.437	-12.013	1.00	0.00
ATOM	2551	HD1	HIS	36	6.202	13.362	-12.790	1.00	0.00
ATOM	2552	HE2	HIS	36	4.194	10.338	-14.407	1.00	0.00
ATOM	2553	N	GLY	37	2.403	13.559	-11.408	1.00	38.78
ATOM	2554	CA	GLY	37	1.248	12.964	-10.743	1.00	38.47
ATOM	2555	C	GLY	37	-0.096	13.228	-11.422	1.00	36.88
ATOM	2556	O	GLY	37	-0.129	13.644	-12.580	1.00	37.63
ATOM	2557	H	GLY	37	3.105	12.971	-11.713	1.00	0.00
ATOM	2558	N	PRO	37A	-1.226	12.954	-10.740	1.00	35.09
ATOM	2559	CA	PRO	37A	-2.480	13.700	-10.906	1.00	33.69
ATOM	2560	C	PRO	37A	-2.324	15.161	-10.497	1.00	32.82
ATOM	2561	O	PRO	37A	-3.130	16.012	-10.865	1.00	32.88
ATOM	2562	CB	PRO	37A	-3.433	12.973	-9.962	1.00	33.08
ATOM	2563	CG	PRO	37A	-2.909	11.584	-9.955	1.00	33.35

63/126

ATOM	2564	CD	PRO	37A	-1.429	11.804	-9.845	1.00	34.14
ATOM	2565	N	TYR	37B	-1.309	15.429	-9.686	1.00	31.45
ATOM	2566	CA	TYR	37B	-1.022	16.776	-9.225	1.00	30.81
ATOM	2567	C	TYR	37B	0.453	16.838	-8.859	1.00	31.27
ATOM	2568	O	TYR	37B	1.084	15.809	-8.581	1.00	32.71
ATOM	2569	CB	TYR	37B	-1.881	17.142	-8.011	1.00	28.47
ATOM	2570	CG	TYR	37B	-1.623	16.309	-6.772	1.00	28.52
ATOM	2571	CD1	TYR	37B	-0.927	16.835	-5.685	1.00	28.66
ATOM	2572	CD2	TYR	37B	-2.107	15.008	-6.670	1.00	29.80
ATOM	2573	CE1	TYR	37B	-0.726	16.082	-4.527	1.00	28.84
ATOM	2574	CE2	TYR	37B	-1.912	14.249	-5.513	1.00	29.05
ATOM	2575	CZ	TYR	37B	-1.225	14.793	-4.450	1.00	28.75
ATOM	2576	OH	TYR	37B	-1.064	14.054	-3.299	1.00	30.25
ATOM	2577	H	TYR	37B	-0.674	14.741	-9.401	1.00	0.00
ATOM	2578	HH	TYR	37B	-0.442	14.569	-2.765	1.00	0.00
ATOM	2579	N	TRP	38	1.002	18.045	-8.875	1.00	29.57
ATOM	2580	CA	TRP	38	2.395	18.258	-8.535	1.00	27.83
ATOM	2581	C	TRP	38	2.636	17.823	-7.102	1.00	27.67
ATOM	2582	O	TRP	38	2.667	18.633	-6.172	1.00	27.98
ATOM	2583	CB	TRP	38	2.738	19.719	-8.756	1.00	27.58
ATOM	2584	CG	TRP	38	2.673	20.045	-10.193	1.00	27.51
ATOM	2585	CD1	TRP	38	1.665	20.691	-10.844	1.00	26.98
ATOM	2586	CD2	TRP	38	3.627	19.665	-11.194	1.00	27.86
ATOM	2587	NE1	TRP	38	1.927	20.728	-12.192	1.00	27.54
ATOM	2588	CE2	TRP	38	3.128	20.109	-12.434	1.00	27.71
ATOM	2589	CE3	TRP	38	4.858	18.990	-11.161	1.00	27.01
ATOM	2590	CZ2	TRP	38	3.817	19.899	-13.638	1.00	27.95
ATOM	2591	CZ3	TRP	38	5.539	18.784	-12.357	1.00	27.43
ATOM	2592	CH2	TRP	38	5.016	19.238	-13.579	1.00	27.02
ATOM	2593	H	TRP	38	0.448	18.808	-9.123	1.00	0.00
ATOM	2594	HE1	TRP	38	1.328	21.111	-12.868	1.00	0.00
ATOM	2595	N	MET	39	2.836	16.525	-6.955	1.00	27.45
ATOM	2596	CA	MET	39	3.039	15.888	-5.674	1.00	28.88
ATOM	2597	C	MET	39	4.417	16.177	-5.078	1.00	28.83
ATOM	2598	O	MET	39	5.414	16.207	-5.802	1.00	30.54
ATOM	2599	CB	MET	39	2.873	14.391	-5.886	1.00	31.85
ATOM	2600	CG	MET	39	2.399	13.616	-4.692	1.00	34.61
ATOM	2601	SD	MET	39	2.224	11.903	-5.183	1.00	37.58
ATOM	2602	CE	MET	39	1.325	12.088	-6.775	1.00	35.07
ATOM	2603	H	MET	39	2.895	15.993	-7.783	1.00	0.00
ATOM	2604	N	HIS	40	4.465	16.430	-3.770	1.00	25.91
ATOM	2605	CA	HIS	40	5.732	16.680	-3.077	1.00	23.53
ATOM	2606	C	HIS	40	6.411	15.335	-2.854	1.00	22.49
ATOM	2607	O	HIS	40	5.818	14.460	-2.223	1.00	24.35
ATOM	2608	CB	HIS	40	5.482	17.342	-1.709	1.00	21.80
ATOM	2609	CG	HIS	40	6.626	17.214	-0.743	1.00	19.85
ATOM	2610	ND1	HIS	40	7.636	18.144	-0.655	1.00	19.82
ATOM	2611	CD2	HIS	40	6.925	16.252	0.165	1.00	19.92
ATOM	2612	CE1	HIS	40	8.511	17.765	0.259	1.00	19.50
ATOM	2613	NE2	HIS	40	8.104	16.618	0.771	1.00	19.97
ATOM	2614	H	HIS	40	3.627	16.493	-3.265	1.00	0.00
ATOM	2615	HD1	HIS	40	7.692	18.959	-1.198	1.00	0.00
ATOM	2616	HE2	HIS	40	8.620	16.094	1.430	1.00	0.00
ATOM	2617	N	PHE	41	7.641	15.163	-3.335	1.00	19.65
ATOM	2618	CA	PHE	41	8.345	13.896	-3.122	1.00	17.53
ATOM	2619	C	PHE	41	9.585	14.014	-2.227	1.00	16.64
ATOM	2620	O	PHE	41	10.013	13.045	-1.599	1.00	15.87
ATOM	2621	CB	PHE	41	8.672	13.190	-4.461	1.00	16.21
ATOM	2622	CG	PHE	41	9.729	13.875	-5.302	1.00	15.02
ATOM	2623	CD1	PHE	41	11.068	13.529	-5.179	1.00	13.68
ATOM	2624	CD2	PHE	41	9.382	14.833	-6.243	1.00	15.50
ATOM	2625	CE1	PHE	41	12.040	14.125	-5.977	1.00	13.28
ATOM	2626	CE2	PHE	41	10.357	15.432	-7.047	1.00	15.21

ATOM	2627	CZ	PHE	41	11.686	15.075	-6.910	1.00	13.41
ATOM	2628	H	PHE	41	8.037	15.900	-3.847	1.00	0.00
ATOM	2629	N	CYS	42	10.108	15.226	-2.106	1.00	16.41
ATOM	2630	CA	CYS	42	11.295	15.468	-1.305	1.00	15.51
ATOM	2631	C	CYS	42	11.450	16.939	-0.995	1.00	16.13
ATOM	2632	O	CYS	42	10.766	17.782	-1.577	1.00	17.43
ATOM	2633	CB	CYS	42	12.527	15.022	-2.072	1.00	13.97
ATOM	2634	SG	CYS	42	12.861	13.250	-1.978	1.00	13.42
ATOM	2635	H	CYS	42	9.721	15.976	-2.597	1.00	0.00
ATOM	2636	N	GLY	43	12.358	17.239	-0.080	1.00	15.27
ATOM	2637	CA	GLY	43	12.609	18.612	0.290	1.00	15.57
ATOM	2638	C	GLY	43	13.929	18.982	-0.330	1.00	17.30
ATOM	2639	O	GLY	43	14.477	18.211	-1.122	1.00	19.14
ATOM	2640	H	GLY	43	12.929	16.526	0.285	1.00	0.00
ATOM	2641	N	GLY	44	14.447	20.146	0.040	1.00	17.05
ATOM	2642	CA	GLY	44	15.721	20.605	-0.485	1.00	17.02
ATOM	2643	C	GLY	44	16.006	21.969	0.100	1.00	17.99
ATOM	2644	O	GLY	44	15.235	22.446	0.935	1.00	19.89
ATOM	2645	H	GLY	44	13.969	20.713	0.677	1.00	0.00
ATOM	2646	N	SER	45	17.105	22.594	-0.297	1.00	17.11
ATOM	2647	CA	SER	45	17.423	23.918	0.213	1.00	17.01
ATOM	2648	C	SER	45	18.030	24.784	-0.866	1.00	17.61
ATOM	2649	O	SER	45	18.636	24.278	-1.814	1.00	19.51
ATOM	2650	CB	SER	45	18.381	23.823	1.391	1.00	17.98
ATOM	2651	OG	SER	45	19.564	23.162	1.003	1.00	21.12
ATOM	2652	H	SER	45	17.735	22.124	-0.887	1.00	0.00
ATOM	2653	HG	SER	45	20.281	23.346	1.622	1.00	0.00
ATOM	2654	N	LEU	46	17.826	26.087	-0.739	1.00	17.02
ATOM	2655	CA	LEU	46	18.359	27.052	-1.689	1.00	17.24
ATOM	2656	C	LEU	46	19.774	27.389	-1.223	1.00	19.59
ATOM	2657	O	LEU	46	19.949	28.114	-0.245	1.00	21.65
ATOM	2658	CB	LEU	46	17.490	28.302	-1.658	1.00	14.31
ATOM	2659	CG	LEU	46	17.444	29.197	-2.882	1.00	10.66
ATOM	2660	CD1	LEU	46	16.885	28.416	-4.041	1.00	8.44
ATOM	2661	CD2	LEU	46	16.562	30.389	-2.572	1.00	9.92
ATOM	2662	H	LEU	46	17.269	26.385	0.007	1.00	0.00
ATOM	2663	N	ILE	47	20.789	26.839	-1.882	1.00	20.63
ATOM	2664	CA	ILE	47	22.166	27.108	-1.475	1.00	21.59
ATOM	2665	C	ILE	47	22.809	28.261	-2.243	1.00	26.00
ATOM	2666	O	ILE	47	23.941	28.657	-1.956	1.00	28.12
ATOM	2667	CB	ILE	47	23.040	25.860	-1.609	1.00	18.83
ATOM	2668	CG1	ILE	47	23.199	25.474	-3.082	1.00	17.78
ATOM	2669	CG2	ILE	47	22.426	24.729	-0.812	1.00	19.00
ATOM	2670	H	ILE	47	20.574	26.259	-2.650	1.00	0.00
ATOM	2671	CD	ILE	47	24.117	24.279	-3.329	1.00	15.97
ATOM	2672	N	HIS	48	22.063	28.812	-3.197	1.00	28.50
ATOM	2673	CA	HIS	48	22.507	29.919	-4.048	1.00	29.64
ATOM	2674	C	HIS	48	21.244	30.318	-4.802	1.00	30.24
ATOM	2675	O	HIS	48	20.396	29.470	-5.071	1.00	30.81
ATOM	2676	CB	HIS	48	23.581	29.422	-5.026	1.00	31.70
ATOM	2677	CG	HIS	48	24.036	30.448	-6.018	1.00	33.16
ATOM	2678	ND1	HIS	48	25.240	31.110	-5.904	1.00	34.00
ATOM	2679	CD2	HIS	48	23.466	30.901	-7.161	1.00	32.66
ATOM	2680	CE1	HIS	48	25.392	31.925	-6.932	1.00	35.23
ATOM	2681	NE2	HIS	48	24.330	31.816	-7.710	1.00	33.30
ATOM	2682	H	HIS	48	21.159	28.462	-3.362	1.00	0.00
ATOM	2683	HD1	HIS	48	25.904	30.997	-5.169	1.00	0.00
ATOM	2684	HE2	HIS	48	24.209	32.306	-8.554	1.00	0.00
ATOM	2685	N	PRO	49	21.104	31.598	-5.173	1.00	30.34
ATOM	2686	CA	PRO	49	19.912	32.056	-5.897	1.00	30.07
ATOM	2687	C	PRO	49	19.492	31.326	-7.187	1.00	29.56
ATOM	2688	O	PRO	49	18.592	31.792	-7.875	1.00	31.26
ATOM	2689	CB	PRO	49	20.233	33.525	-6.166	1.00	29.78

65/126

ATOM	2690	CG	PRO	49	21.000	33.915	-4.954	1.00	29.91
ATOM	2691	CD	PRO	49	21.950	32.747	-4.800	1.00	31.01
ATOM	2692	N	GLN	50	20.099	30.188	-7.511	1.00	27.66
ATOM	2693	CA	GLN	50	19.724	29.481	-8.733	1.00	26.78
ATOM	2694	C	GLN	50	20.006	27.979	-8.707	1.00	25.56
ATOM	2695	O	GLN	50	19.869	27.288	-9.719	1.00	26.68
ATOM	2696	CB	GLN	50	20.415	30.118	-9.934	1.00	28.29
ATOM	2697	CG	GLN	50	19.857	29.663	-11.266	1.00	31.10
ATOM	2698	CD	GLN	50	20.549	30.314	-12.434	1.00	32.60
ATOM	2699	OE1	GLN	50	21.479	31.106	-12.258	1.00	34.73
ATOM	2700	NE2	GLN	50	20.107	29.981	-13.640	1.00	32.63
ATOM	2701	H	GLN	50	20.762	29.768	-6.949	1.00	0.00
ATOM	2702	HE21	GLN	50	19.396	29.305	-13.699	1.00	0.00
ATOM	2703	HE22	GLN	50	20.518	30.403	-14.419	1.00	0.00
ATOM	2704	N	TRP	51	20.360	27.467	-7.540	1.00	22.55
ATOM	2705	CA	TRP	51	20.645	26.055	-7.403	1.00	20.61
ATOM	2706	C	TRP	51	19.932	25.533	-6.187	1.00	20.60
ATOM	2707	O	TRP	51	19.655	26.275	-5.249	1.00	21.95
ATOM	2708	CB	TRP	51	22.135	25.831	-7.225	1.00	20.58
ATOM	2709	CG	TRP	51	22.913	26.065	-8.442	1.00	21.12
ATOM	2710	CD1	TRP	51	23.459	27.243	-8.853	1.00	20.74
ATOM	2711	CD2	TRP	51	23.261	25.091	-9.426	1.00	21.74
ATOM	2712	NE1	TRP	51	24.132	27.062	-10.037	1.00	22.47
ATOM	2713	CE2	TRP	51	24.026	25.748	-10.411	1.00	21.72
ATOM	2714	CE3	TRP	51	23.000	23.723	-9.569	1.00	22.40
ATOM	2715	CZ2	TRP	51	24.538	25.087	-11.530	1.00	22.08
ATOM	2716	CZ3	TRP	51	23.511	23.061	-10.684	1.00	23.51
ATOM	2717	CH2	TRP	51	24.271	23.747	-11.650	1.00	22.85
ATOM	2718	H	TRP	51	20.359	28.006	-6.724	1.00	0.00
ATOM	2719	HE1	TRP	51	24.588	27.744	-10.577	1.00	0.00
ATOM	2720	N	VAL	52	19.642	24.246	-6.194	1.00	20.29
ATOM	2721	CA	VAL	52	18.977	23.631	-5.070	1.00	20.05
ATOM	2722	C	VAL	52	19.770	22.384	-4.722	1.00	19.26
ATOM	2723	O	VAL	52	20.294	21.699	-5.608	1.00	18.68
ATOM	2724	CB	VAL	52	17.521	23.267	-5.415	1.00	21.89
ATOM	2725	CG1	VAL	52	16.800	22.733	-4.185	1.00	23.63
ATOM	2726	CG2	VAL	52	16.792	24.488	-5.957	1.00	22.79
ATOM	2727	H	VAL	52	19.849	23.708	-6.986	1.00	0.00
ATOM	2728	N	LEU	53	19.927	22.151	-3.426	1.00	18.21
ATOM	2729	CA	LEU	53	20.655	20.995	-2.931	1.00	17.23
ATOM	2730	C	LEU	53	19.628	19.984	-2.434	1.00	17.42
ATOM	2731	O	LEU	53	18.676	20.343	-1.735	1.00	17.68
ATOM	2732	CB	LEU	53	21.604	21.423	-1.807	1.00	15.02
ATOM	2733	CG	LEU	53	22.556	20.410	-1.177	1.00	12.62
ATOM	2734	CD1	LEU	53	23.370	19.700	-2.234	1.00	12.84
ATOM	2735	CD2	LEU	53	23.459	21.137	-0.210	1.00	12.00
ATOM	2736	H	LEU	53	19.536	22.787	-2.792	1.00	0.00
ATOM	2737	N	THR	54	19.802	18.732	-2.827	1.00	17.53
ATOM	2738	CA	THR	54	18.878	17.684	-2.436	1.00	19.37
ATOM	2739	C	THR	54	19.627	16.368	-2.412	1.00	20.64
ATOM	2740	O	THR	54	20.732	16.270	-2.949	1.00	22.18
ATOM	2741	CB	THR	54	17.708	17.573	-3.444	1.00	19.81
ATOM	2742	OG1	THR	54	16.767	16.593	-2.990	1.00	20.34
ATOM	2743	CG2	THR	54	18.222	17.172	-4.823	1.00	18.84
ATOM	2744	H	THR	54	20.562	18.501	-3.407	1.00	0.00
ATOM	2745	HG1	THR	54	17.052	15.713	-3.244	1.00	0.00
ATOM	2746	N	ALA	55	19.032	15.369	-1.766	1.00	20.18
ATOM	2747	CA	ALA	55	19.622	14.040	-1.678	1.00	19.11
ATOM	2748	C	ALA	55	19.480	13.435	-3.067	1.00	19.11
ATOM	2749	O	ALA	55	18.418	13.518	-3.684	1.00	19.41
ATOM	2750	CB	ALA	55	18.881	13.191	-0.645	1.00	17.89
ATOM	2751	H	ALA	55	18.154	15.567	-1.391	1.00	0.00
ATOM	2752	N	ALA	56	20.555	12.841	-3.563	1.00	18.83

66/176

ATOM	2753	CA	ALA	56	20.552	12.249	-4.886	1.00	17.36
ATOM	2754	C	ALA	56	19.450	11.221	-5.051	1.00	17.46
ATOM	2755	O	ALA	56	18.778	11.198	-6.076	1.00	18.33
ATOM	2756	CB	ALA	56	21.892	11.624	-5.179	1.00	16.53
ATOM	2757	H	ALA	56	21.351	12.744	-2.995	1.00	0.00
ATOM	2758	N	HIS	57	19.200	10.424	-4.019	1.00	17.19
ATOM	2759	CA	HIS	57	18.180	9.388	-4.135	1.00	17.54
ATOM	2760	C	HIS	57	16.794	9.884	-4.509	1.00	17.73
ATOM	2761	O	HIS	57	15.974	9.104	-5.003	1.00	19.07
ATOM	2762	CB	HIS	57	18.140	8.458	-2.912	1.00	15.19
ATOM	2763	CG	HIS	57	17.451	9.028	-1.716	1.00	13.02
ATOM	2764	ND1	HIS	57	18.109	9.781	-0.770	1.00	14.48
ATOM	2765	CD2	HIS	57	16.182	8.885	-1.266	1.00	12.46
ATOM	2766	CE1	HIS	57	17.280	10.071	0.217	1.00	14.99
ATOM	2767	NE2	HIS	57	16.104	9.540	-0.060	1.00	13.56
ATOM	2768	H	HIS	57	19.735	10.539	-3.222	1.00	0.00
ATOM	2769	HD1	HIS	57	19.029	10.101	-0.797	1.00	0.00
ATOM	2770	HE2	HIS	57	15.364	9.660	0.589	1.00	0.00
ATOM	2771	N	CYS	58	16.557	11.183	-4.325	1.00	15.90
ATOM	2772	CA	CYS	58	15.270	11.781	-4.664	1.00	13.65
ATOM	2773	C	CYS	58	15.140	11.922	-6.171	1.00	13.01
ATOM	2774	O	CYS	58	14.041	11.869	-6.716	1.00	12.43
ATOM	2775	CB	CYS	58	15.115	13.157	-4.011	1.00	11.81
ATOM	2776	SG	CYS	58	14.878	13.143	-2.206	1.00	12.16
ATOM	2777	H	CYS	58	17.254	11.786	-4.000	1.00	0.00
ATOM	2778	N	VAL	59	16.269	12.060	-6.850	1.00	13.50
ATOM	2779	CA	VAL	59	16.254	12.235	-8.287	1.00	15.24
ATOM	2780	C	VAL	59	17.119	11.230	-9.051	1.00	16.81
ATOM	2781	O	VAL	59	17.322	11.381	-10.255	1.00	17.91
ATOM	2782	CB	VAL	59	16.652	13.692	-8.653	1.00	15.93
ATOM	2783	CG1	VAL	59	15.678	14.675	-8.019	1.00	15.10
ATOM	2784	CG2	VAL	59	18.055	14.000	-8.162	1.00	16.07
ATOM	2785	H	VAL	59	17.135	12.040	-6.403	1.00	0.00
ATOM	2786	N	GLY	60	17.565	10.171	-8.377	1.00	18.29
ATOM	2787	CA	GLY	60	18.400	9.171	-9.027	1.00	19.78
ATOM	2788	C	GLY	60	18.211	7.780	-8.448	1.00	21.73
ATOM	2789	O	GLY	60	17.307	7.587	-7.633	1.00	22.76
ATOM	2790	H	GLY	60	17.367	10.069	-7.421	1.00	0.00
ATOM	2791	N	PRO	60A	19.035	6.786	-8.836	1.00	22.38
ATOM	2792	CA	PRO	60A	20.102	6.848	-9.840	1.00	23.99
ATOM	2793	C	PRO	60A	19.603	6.798	-11.284	1.00	26.78
ATOM	2794	O	PRO	60A	20.330	7.160	-12.211	1.00	26.72
ATOM	2795	CB	PRO	60A	20.949	5.627	-9.499	1.00	22.26
ATOM	2796	CG	PRO	60A	19.927	4.652	-9.071	1.00	21.97
ATOM	2797	CD	PRO	60A	19.061	5.483	-8.153	1.00	21.93
ATOM	2798	N	ASP	60B	18.385	6.312	-11.483	1.00	29.92
ATOM	2799	CA	ASP	60B	17.815	6.248	-12.821	1.00	32.24
ATOM	2800	C	ASP	60B	17.413	7.643	-13.261	1.00	32.61
ATOM	2801	O	ASP	60B	16.755	8.369	-12.508	1.00	33.74
ATOM	2802	CB	ASP	60B	16.625	5.295	-12.852	1.00	35.70
ATOM	2803	CG	ASP	60B	17.052	3.843	-13.013	1.00	39.63
ATOM	2804	OD1	ASP	60B	16.328	3.088	-13.698	1.00	42.71
ATOM	2805	OD2	ASP	60B	18.124	3.463	-12.486	1.00	39.48
ATOM	2806	H	ASP	60B	17.877	5.898	-10.759	1.00	0.00
ATOM	2807	N	VAL	60C	17.825	8.010	-14.471	1.00	32.19
ATOM	2808	CA	VAL	60C	17.566	9.328	-15.042	1.00	31.81
ATOM	2809	C	VAL	60C	16.098	9.726	-15.061	1.00	32.78
ATOM	2810	O	VAL	60C	15.241	8.972	-15.521	1.00	31.88
ATOM	2811	CB	VAL	60C	18.128	9.439	-16.465	1.00	30.90
ATOM	2812	CG1	VAL	60C	17.951	10.853	-16.988	1.00	31.50
ATOM	2813	CG2	VAL	60C	19.585	9.053	-16.480	1.00	30.47
ATOM	2814	H	VAL	60C	18.260	7.321	-14.992	1.00	0.00
ATOM	2815	N	LYS	60D	15.827	10.931	-14.571	1.00	34.63

69/126

ATOM	2816	CA	LYS	60D	14.473	11.471	-14.516	1.00	36.61
ATOM	2817	C	LYS	60D	14.276	12.493	-15.639	1.00	37.86
ATOM	2818	O	LYS	60D	15.255	12.944	-16.248	1.00	38.80
ATOM	2819	CB	LYS	60D	14.231	12.134	-13.156	1.00	37.46
ATOM	2820	CG	LYS	60D	14.432	11.209	-11.958	1.00	39.46
ATOM	2821	CD	LYS	60D	13.524	9.976	-12.021	1.00	41.12
ATOM	2822	CE	LYS	60D	13.587	9.147	-10.743	1.00	41.39
ATOM	2823	NZ	LYS	60D	14.981	8.765	-10.396	1.00	42.83
ATOM	2824	H	LYS	60D	16.579	11.494	-14.309	1.00	0.00
ATOM	2825	HZ1	LYS	60D	15.530	9.628	-10.211	1.00	0.00
ATOM	2826	HZ2	LYS	60D	15.444	8.311	-11.221	1.00	0.00
ATOM	2827	HZ3	LYS	60D	15.003	8.161	-9.553	1.00	0.00
ATOM	2828	N	ASP	60E	13.018	12.835	-15.927	1.00	37.69
ATOM	2829	CA	ASP	60E	12.687	13.813	-16.971	1.00	36.59
ATOM	2830	C	ASP	60E	12.401	15.168	-16.319	1.00	34.20
ATOM	2831	O	ASP	60E	11.424	15.321	-15.585	1.00	35.05
ATOM	2832	CB	ASP	60E	11.468	13.344	-17.780	1.00	39.68
ATOM	2833	CG	ASP	60E	11.082	14.316	-18.901	1.00	42.67
ATOM	2834	OD1	ASP	60E	11.798	15.318	-19.148	1.00	43.63
ATOM	2835	OD2	ASP	60E	10.042	14.073	-19.551	1.00	44.07
ATOM	2836	H	ASP	60E	12.267	12.460	-15.423	1.00	0.00
ATOM	2837	N	LEU	61	13.233	16.157	-16.628	1.00	30.70
ATOM	2838	CA	LEU	61	13.104	17.495	-16.058	1.00	28.24
ATOM	2839	C	LEU	61	11.737	18.127	-16.259	1.00	27.08
ATOM	2840	O	LEU	61	11.274	18.901	-15.415	1.00	26.94
ATOM	2841	CB	LEU	61	14.184	18.420	-16.614	1.00	28.43
ATOM	2842	CG	LEU	61	15.621	18.307	-16.103	1.00	27.91
ATOM	2843	CD1	LEU	61	16.104	16.877	-16.139	1.00	28.27
ATOM	2844	CD2	LEU	61	16.511	19.182	-16.968	1.00	29.59
ATOM	2845	H	LEU	61	13.920	15.959	-17.295	1.00	0.00
ATOM	2846	N	ALA	62	11.082	17.784	-17.364	1.00	26.52
ATOM	2847	CA	ALA	62	9.757	18.320	-17.664	1.00	25.24
ATOM	2848	C	ALA	62	8.742	17.859	-16.616	1.00	24.34
ATOM	2849	O	ALA	62	7.679	18.462	-16.459	1.00	24.36
ATOM	2850	CB	ALA	62	9.313	17.884	-19.056	1.00	23.95
ATOM	2851	H	ALA	62	11.490	17.124	-17.969	1.00	0.00
ATOM	2852	N	ALA	63	9.076	16.779	-15.917	1.00	23.30
ATOM	2853	CA	ALA	63	8.213	16.212	-14.891	1.00	23.20
ATOM	2854	C	ALA	63	8.484	16.808	-13.514	1.00	22.80
ATOM	2855	O	ALA	63	7.712	16.593	-12.577	1.00	22.80
ATOM	2856	CB	ALA	63	8.386	14.698	-14.851	1.00	22.57
ATOM	2857	H	ALA	63	9.919	16.312	-16.072	1.00	0.00
ATOM	2858	N	LEU	64	9.569	17.565	-13.403	1.00	22.39
ATOM	2859	CA	LEU	64	9.953	18.176	-12.143	1.00	23.25
ATOM	2860	C	LEU	64	9.691	19.673	-12.040	1.00	23.93
ATOM	2861	O	LEU	64	9.748	20.421	-13.029	1.00	24.43
ATOM	2862	CB	LEU	64	11.432	17.929	-11.854	1.00	24.96
ATOM	2863	CG	LEU	64	11.853	16.614	-11.213	1.00	26.97
ATOM	2864	CD1	LEU	64	11.580	15.442	-12.152	1.00	28.52
ATOM	2865	CD2	LEU	64	13.329	16.705	-10.882	1.00	26.77
ATOM	2866	H	LEU	64	10.108	17.782	-14.188	1.00	0.00
ATOM	2867	N	ARG	65	9.471	20.104	-10.805	1.00	23.23
ATOM	2868	CA	ARG	65	9.219	21.493	-10.474	1.00	22.50
ATOM	2869	C	ARG	65	9.721	21.704	-9.052	1.00	22.11
ATOM	2870	O	ARG	65	9.804	20.750	-8.271	1.00	22.73
ATOM	2871	CB	ARG	65	7.721	21.796	-10.531	1.00	23.16
ATOM	2872	CG	ARG	65	7.140	21.829	-11.914	1.00	22.86
ATOM	2873	CD	ARG	65	7.728	22.963	-12.699	1.00	25.08
ATOM	2874	NE	ARG	65	7.825	22.594	-14.100	1.00	27.11
ATOM	2875	CZ	ARG	65	6.877	22.819	-14.999	1.00	27.62
ATOM	2876	NH1	ARG	65	5.749	23.428	-14.643	1.00	28.46
ATOM	2877	NH2	ARG	65	7.047	22.393	-16.241	1.00	28.68
ATOM	2878	H	ARG	65	9.476	19.442	-10.080	1.00	0.00

68/176

ATOM	2879	HE	ARG	65	8.651	22.085	-14.311	1.00	0.00
ATOM	2880	HH11	ARG	65	5.617	23.715	-13.689	1.00	0.00
ATOM	2881	HH12	ARG	65	5.006	23.621	-15.284	1.00	0.00
ATOM	2882	HH21	ARG	65	7.879	21.881	-16.479	1.00	0.00
ATOM	2883	HH22	ARG	65	6.370	22.515	-16.970	1.00	0.00
ATOM	2884	N	VAL	66	10.043	22.953	-8.728	1.00	20.10
ATOM	2885	CA	VAL	66	10.530	23.338	-7.409	1.00	17.28
ATOM	2886	C	VAL	66	9.613	24.402	-6.799	1.00	17.58
ATOM	2887	O	VAL	66	9.236	25.367	-7.466	1.00	18.98
ATOM	2888	CB	VAL	66	11.956	23.919	-7.511	1.00	14.84
ATOM	2889	CG1	VAL	66	12.364	24.570	-6.205	1.00	14.99
ATOM	2890	CG2	VAL	66	12.933	22.825	-7.878	1.00	14.12
ATOM	2891	H	VAL	66	9.993	23.638	-9.420	1.00	0.00
ATOM	2892	N	GLN	67	9.212	24.196	-5.555	1.00	15.80
ATOM	2893	CA	GLN	67	8.375	25.158	-4.858	1.00	14.72
ATOM	2894	C	GLN	67	9.218	25.660	-3.724	1.00	14.29
ATOM	2895	O	GLN	67	9.722	24.868	-2.950	1.00	16.53
ATOM	2896	CB	GLN	67	7.131	24.485	-4.291	1.00	14.76
ATOM	2897	CG	GLN	67	6.405	25.311	-3.242	1.00	16.40
ATOM	2898	CD	GLN	67	5.834	26.622	-3.776	1.00	19.05
ATOM	2899	OE1	GLN	67	6.067	27.011	-4.924	1.00	19.16
ATOM	2900	NE2	GLN	67	5.085	27.313	-2.934	1.00	20.50
ATOM	2901	H	GLN	67	9.454	23.368	-5.096	1.00	0.00
ATOM	2902	HE21	GLN	67	5.053	26.945	-2.028	1.00	0.00
ATOM	2903	HE22	GLN	67	4.519	28.065	-3.191	1.00	0.00
ATOM	2904	N	LEU	68	9.380	26.965	-3.615	1.00	15.17
ATOM	2905	CA	LEU	68	10.193	27.518	-2.537	1.00	18.04
ATOM	2906	C	LEU	68	9.415	27.477	-1.221	1.00	19.10
ATOM	2907	O	LEU	68	8.333	26.897	-1.169	1.00	20.36
ATOM	2908	CB	LEU	68	10.632	28.945	-2.889	1.00	19.50
ATOM	2909	CG	LEU	68	11.272	29.107	-4.282	1.00	21.10
ATOM	2910	CD1	LEU	68	11.599	30.560	-4.562	1.00	21.08
ATOM	2911	CD2	LEU	68	12.521	28.239	-4.414	1.00	21.93
ATOM	2912	H	LEU	68	8.938	27.552	-4.261	1.00	0.00
ATOM	2913	N	ARG	69	9.985	28.052	-0.162	1.00	20.44
ATOM	2914	CA	ARG	69	9.364	28.095	1.173	1.00	21.26
ATOM	2915	C	ARG	69	7.858	28.324	1.116	1.00	21.99
ATOM	2916	O	ARG	69	7.398	29.319	0.559	1.00	23.44
ATOM	2917	CB	ARG	69	10.009	29.204	2.007	1.00	22.01
ATOM	2918	CG	ARG	69	9.411	29.425	3.395	1.00	21.35
ATOM	2919	CD	ARG	69	9.821	28.351	4.375	1.00	19.91
ATOM	2920	NE	ARG	69	9.553	28.744	5.757	1.00	20.69
ATOM	2921	CZ	ARG	69	8.345	28.740	6.320	1.00	20.75
ATOM	2922	NH1	ARG	69	7.282	28.373	5.620	1.00	20.48
ATOM	2923	NH2	ARG	69	8.196	29.057	7.598	1.00	20.48
ATOM	2924	H	ARG	69	10.883	28.425	-0.269	1.00	0.00
ATOM	2925	HE	ARG	69	10.338	29.042	6.252	1.00	0.00
ATOM	2926	HH11	ARG	69	7.358	28.083	4.667	1.00	0.00
ATOM	2927	HH12	ARG	69	6.391	28.356	6.084	1.00	0.00
ATOM	2928	HH21	ARG	69	8.889	29.324	8.257	1.00	0.00
ATOM	2929	HH22	ARG	69	7.266	29.001	7.985	1.00	0.00
ATOM	2930	N	GLU	70	7.103	27.445	1.764	1.00	21.84
ATOM	2931	CA	GLU	70	5.651	27.532	1.763	1.00	22.23
ATOM	2932	C	GLU	70	5.104	26.969	3.076	1.00	23.30
ATOM	2933	O	GLU	70	5.443	25.846	3.452	1.00	23.20
ATOM	2934	CB	GLU	70	5.139	26.719	0.576	1.00	21.53
ATOM	2935	CG	GLU	70	3.662	26.816	0.277	1.00	21.77
ATOM	2936	CD	GLU	70	3.311	26.073	-0.996	1.00	22.44
ATOM	2937	OE1	GLU	70	2.392	26.511	-1.718	1.00	23.02
ATOM	2938	OE2	GLU	70	3.987	25.065	-1.297	1.00	22.45
ATOM	2939	H	GLU	70	7.514	26.683	2.224	1.00	0.00
ATOM	2940	N	GLN	71	4.300	27.754	3.795	1.00	24.46
ATOM	2941	CA	GLN	71	3.733	27.296	5.073	1.00	26.04

ATOM	2942	C	GLN	71	2.814	26.089	4.968	1.00	27.48
ATOM	2943	O	GLN	71	2.712	25.314	5.923	1.00	29.36
ATOM	2944	CB	GLN	71	2.951	28.402	5.779	1.00	26.68
ATOM	2945	CG	GLN	71	3.752	29.246	6.749	1.00	28.96
ATOM	2946	CD	GLN	71	4.430	28.450	7.855	1.00	28.60
ATOM	2947	OE1	GLN	71	5.638	28.574	8.048	1.00	30.20
ATOM	2948	NE2	GLN	71	3.665	27.659	8.595	1.00	27.33
ATOM	2949	H	GLN	71	4.068	28.640	3.448	1.00	0.00
ATOM	2950	HE21	GLN	71	2.713	27.548	8.437	1.00	0.00
ATOM	2951	HE22	GLN	71	4.140	27.223	9.342	1.00	0.00
ATOM	2952	N	HIS	72	2.100	25.967	3.850	1.00	26.56
ATOM	2953	CA	HIS	72	1.176	24.860	3.651	1.00	25.54
ATOM	2954	C	HIS	72	1.350	24.268	2.259	1.00	26.53
ATOM	2955	O	HIS	72	1.008	24.893	1.254	1.00	26.89
ATOM	2956	CB	HIS	72	-0.246	25.337	3.905	1.00	24.25
ATOM	2957	CG	HIS	72	-0.465	25.802	5.309	1.00	24.96
ATOM	2958	ND1	HIS	72	-0.510	24.935	6.379	1.00	25.83
ATOM	2959	CD2	HIS	72	-0.607	27.045	5.829	1.00	24.79
ATOM	2960	CE1	HIS	72	-0.671	25.619	7.497	1.00	25.14
ATOM	2961	NE2	HIS	72	-0.733	26.902	7.190	1.00	24.96
ATOM	2962	H	HIS	72	2.210	26.584	3.096	1.00	0.00
ATOM	2963	HD1	HIS	72	-0.410	23.963	6.263	1.00	0.00
ATOM	2964	HE2	HIS	72	-0.864	27.615	7.848	1.00	0.00
ATOM	2965	N	LEU	73	1.809	23.018	2.242	1.00	26.03
ATOM	2966	CA	LEU	73	2.134	22.267	1.030	1.00	26.58
ATOM	2967	C	LEU	73	1.599	22.527	-0.360	1.00	27.02
ATOM	2968	O	LEU	73	2.320	22.252	-1.321	1.00	30.14
ATOM	2969	CB	LEU	73	2.090	20.760	1.266	1.00	26.60
ATOM	2970	CG	LEU	73	3.444	20.068	1.433	1.00	25.39
ATOM	2971	CD1	LEU	73	3.340	18.656	0.913	1.00	25.50
ATOM	2972	CD2	LEU	73	4.535	20.811	0.687	1.00	25.01
ATOM	2973	H	LEU	73	1.958	22.584	3.113	1.00	0.00
ATOM	2974	N	TYR	74	0.343	22.917	-0.519	1.00	24.10
ATOM	2975	CA	TYR	74	-0.130	23.149	-1.879	1.00	23.81
ATOM	2976	C	TYR	74	-0.955	24.408	-1.978	1.00	27.06
ATOM	2977	O	TYR	74	-1.572	24.693	-3.003	1.00	26.99
ATOM	2978	CB	TYR	74	-0.928	21.950	-2.373	1.00	20.11
ATOM	2979	CG	TYR	74	-0.182	20.644	-2.260	1.00	17.05
ATOM	2980	CD1	TYR	74	-0.371	19.809	-1.162	1.00	16.55
ATOM	2981	CD2	TYR	74	0.718	20.246	-3.242	1.00	15.21
ATOM	2982	CE1	TYR	74	0.319	18.611	-1.044	1.00	15.49
ATOM	2983	CE2	TYR	74	1.411	19.053	-3.134	1.00	14.58
ATOM	2984	CZ	TYR	74	1.208	18.238	-2.036	1.00	15.33
ATOM	2985	OH	TYR	74	1.889	17.047	-1.926	1.00	16.08
ATOM	2986	H	TYR	74	-0.229	23.081	0.248	1.00	0.00
ATOM	2987	HH	TYR	74	1.801	16.700	-1.028	1.00	0.00
ATOM	2988	N	TYR	75	-0.931	25.186	-0.910	1.00	31.65
ATOM	2989	CA	TYR	75	-1.701	26.404	-0.846	1.00	36.39
ATOM	2990	C	TYR	75	-0.778	27.556	-1.244	1.00	39.17
ATOM	2991	O	TYR	75	0.125	27.939	-0.495	1.00	41.04
ATOM	2992	CB	TYR	75	-2.295	26.557	0.568	1.00	39.44
ATOM	2993	CG	TYR	75	-3.060	25.311	1.049	1.00	42.68
ATOM	2994	CD1	TYR	75	-2.380	24.169	1.493	1.00	44.08
ATOM	2995	CD2	TYR	75	-4.455	25.262	1.028	1.00	43.19
ATOM	2996	CE1	TYR	75	-3.073	23.015	1.898	1.00	43.78
ATOM	2997	CE2	TYR	75	-5.153	24.109	1.433	1.00	43.52
ATOM	2998	CZ	TYR	75	-4.455	22.994	1.866	1.00	43.62
ATOM	2999	OH	TYR	75	-5.137	21.864	2.268	1.00	43.43
ATOM	3000	H	TYR	75	-0.265	25.020	-0.212	1.00	0.00
ATOM	3001	HH	TYR	75	-6.095	22.027	2.259	1.00	0.00
ATOM	3002	N	GLN	79	-1.011	28.062	-2.454	1.00	40.20
ATOM	3003	CA	GLN	79	-0.256	29.155	-3.079	1.00	40.33
ATOM	3004	C	GLN	79	0.962	28.596	-3.789	1.00	37.64

20/176

ATOM	3005	O	GLN	79	2.074	29.115	-3.683	1.00	36.67
ATOM	3006	CB	GLN	79	0.124	30.271	-2.086	1.00	45.26
ATOM	3007	CG	GLN	79	0.853	31.509	-2.704	1.00	51.67
ATOM	3008	CD	GLN	79	0.066	32.239	-3.813	1.00	54.23
ATOM	3009	OE1	GLN	79	-1.125	32.540	-3.664	1.00	55.60
ATOM	3010	NE2	GLN	79	0.750	32.553	-4.913	1.00	53.74
ATOM	3011	H	GLN	79	-1.717	27.635	-2.978	1.00	0.00
ATOM	3012	HE21	GLN	79	1.706	32.319	-4.951	1.00	0.00
ATOM	3013	HE22	GLN	79	0.269	33.003	-5.631	1.00	0.00
ATOM	3014	N	ASP	80	0.730	27.512	-4.514	1.00	35.38
ATOM	3015	CA	ASP	80	1.781	26.876	-5.280	1.00	33.84
ATOM	3016	C	ASP	80	2.280	27.868	-6.316	1.00	33.21
ATOM	3017	O	ASP	80	1.506	28.658	-6.853	1.00	33.16
ATOM	3018	CB	ASP	80	1.236	25.644	-6.000	1.00	33.14
ATOM	3019	CG	ASP	80	1.616	24.352	-5.318	1.00	31.13
ATOM	3020	OD1	ASP	80	2.074	24.394	-4.160	1.00	30.14
ATOM	3021	OD2	ASP	80	1.468	23.286	-5.952	1.00	29.87
ATOM	3022	H	ASP	80	-0.147	27.096	-4.508	1.00	0.00
ATOM	3023	N	GLN	81	3.575	27.812	-6.592	1.00	33.02
ATOM	3024	CA	GLN	81	4.220	28.675	-7.572	1.00	32.15
ATOM	3025	C	GLN	81	5.454	27.907	-8.035	1.00	29.69
ATOM	3026	O	GLN	81	6.595	28.306	-7.801	1.00	29.42
ATOM	3027	CB	GLN	81	4.586	30.018	-6.935	1.00	35.77
ATOM	3028	CG	GLN	81	5.297	29.901	-5.590	1.00	41.85
ATOM	3029	CD	GLN	81	4.686	30.786	-4.505	1.00	45.18
ATOM	3030	OE1	GLN	81	4.149	31.867	-4.783	1.00	45.71
ATOM	3031	NE2	GLN	81	4.769	30.326	-3.257	1.00	45.70
ATOM	3032	H	GLN	81	4.122	27.157	-6.102	1.00	0.00
ATOM	3033	HE21	GLN	81	5.209	29.474	-3.068	1.00	0.00
ATOM	3034	HE22	GLN	81	4.349	30.887	-2.576	1.00	0.00
ATOM	3035	N	LEU	82	5.192	26.765	-8.661	1.00	26.81
ATOM	3036	CA	LEU	82	6.225	25.864	-9.158	1.00	24.87
ATOM	3037	C	LEU	82	7.261	26.524	-10.070	1.00	24.59
ATOM	3038	O	LEU	82	6.938	27.426	-10.837	1.00	26.38
ATOM	3039	CB	LEU	82	5.579	24.674	-9.881	1.00	21.39
ATOM	3040	CG	LEU	82	4.519	23.854	-9.139	1.00	18.22
ATOM	3041	CD1	LEU	82	4.728	23.958	-7.647	1.00	18.78
ATOM	3042	CD2	LEU	82	3.134	24.336	-9.488	1.00	20.24
ATOM	3043	H	LEU	82	4.250	26.550	-8.792	1.00	0.00
ATOM	3044	N	LEU	83	8.504	26.067	-9.981	1.00	22.76
ATOM	3045	CA	LEU	83	9.577	26.605	-10.799	1.00	22.62
ATOM	3046	C	LEU	83	10.222	25.495	-11.621	1.00	24.07
ATOM	3047	O	LEU	83	10.481	24.402	-11.107	1.00	23.84
ATOM	3048	CB	LEU	83	10.640	27.258	-9.919	1.00	21.97
ATOM	3049	CG	LEU	83	10.183	28.361	-8.970	1.00	22.43
ATOM	3050	CD1	LEU	83	11.392	29.007	-8.320	1.00	22.99
ATOM	3051	CD2	LEU	83	9.388	29.397	-9.730	1.00	24.38
ATOM	3052	H	LEU	83	8.716	25.397	-9.304	1.00	0.00
ATOM	3053	N	PRO	84	10.445	25.739	-12.923	1.00	24.83
ATOM	3054	CA	PRO	84	11.064	24.737	-13.788	1.00	25.04
ATOM	3055	C	PRO	84	12.568	24.606	-13.539	1.00	26.70
ATOM	3056	O	PRO	84	13.240	25.567	-13.143	1.00	26.43
ATOM	3057	CB	PRO	84	10.771	25.273	-15.183	1.00	24.05
ATOM	3058	CG	PRO	84	10.820	26.734	-14.987	1.00	24.45
ATOM	3059	CD	PRO	84	10.036	26.914	-13.711	1.00	25.04
ATOM	3060	N	VAL	85	13.069	23.395	-13.763	1.00	27.88
ATOM	3061	CA	VAL	85	14.474	23.050	-13.597	1.00	26.80
ATOM	3062	C	VAL	85	15.106	22.978	-14.981	1.00	27.62
ATOM	3063	O	VAL	85	14.478	22.512	-15.931	1.00	29.02
ATOM	3064	CB	VAL	85	14.603	21.677	-12.927	1.00	25.93
ATOM	3065	CG1	VAL	85	16.045	21.216	-12.923	1.00	26.71
ATOM	3066	CG2	VAL	85	14.057	21.743	-11.517	1.00	27.01
ATOM	3067	H	VAL	85	12.479	22.686	-14.091	1.00	0.00

ATOM	3068	N	SER	86	16.357	23.401	-15.089	1.00	27.09
ATOM	3069	CA	SER	86	17.052	23.383	-16.365	1.00	26.70
ATOM	3070	C	SER	86	18.112	22.297	-16.434	1.00	26.19
ATOM	3071	O	SER	86	18.439	21.788	-17.516	1.00	27.64
ATOM	3072	CB	SER	86	17.690	24.743	-16.619	1.00	27.96
ATOM	3073	OG	SER	86	18.409	25.162	-15.478	1.00	30.97
ATOM	3074	H	SER	86	16.834	23.716	-14.302	1.00	0.00
ATOM	3075	HG	SER	86	18.180	26.055	-15.190	1.00	0.00
ATOM	3076	N	ARG	87	18.625	21.900	-15.281	1.00	24.37
ATOM	3077	CA	ARG	87	19.661	20.893	-15.286	1.00	23.98
ATOM	3078	C	ARG	87	19.688	20.201	-13.942	1.00	21.85
ATOM	3079	O	ARG	87	19.490	20.841	-12.912	1.00	21.59
ATOM	3080	CB	ARG	87	20.990	21.593	-15.587	1.00	26.89
ATOM	3081	CG	ARG	87	22.136	20.709	-16.036	1.00	29.45
ATOM	3082	CD	ARG	87	23.149	21.515	-16.846	1.00	29.90
ATOM	3083	NE	ARG	87	23.399	22.830	-16.267	1.00	30.32
ATOM	3084	CZ	ARG	87	24.595	23.284	-15.904	1.00	30.98
ATOM	3085	NH1	ARG	87	25.672	22.524	-16.059	1.00	30.98
ATOM	3086	NH2	ARG	87	24.707	24.499	-15.372	1.00	30.47
ATOM	3087	H	ARG	87	18.353	22.309	-14.434	1.00	0.00
ATOM	3088	HE	ARG	87	22.628	23.433	-16.122	1.00	0.00
ATOM	3089	HH11	ARG	87	25.618	21.608	-16.475	1.00	0.00
ATOM	3090	HH12	ARG	87	26.589	22.864	-15.797	1.00	0.00
ATOM	3091	HH21	ARG	87	23.869	25.063	-15.222	1.00	0.00
ATOM	3092	HH22	ARG	87	25.564	24.907	-15.064	1.00	0.00
ATOM	3093	N	ILE	88	19.850	18.884	-13.969	1.00	20.50
ATOM	3094	CA	ILE	88	19.913	18.066	-12.759	1.00	22.18
ATOM	3095	C	ILE	88	21.308	17.445	-12.703	1.00	23.46
ATOM	3096	O	ILE	88	21.732	16.771	-13.644	1.00	24.82
ATOM	3097	CB	ILE	88	18.859	16.913	-12.780	1.00	22.63
ATOM	3098	CG1	ILE	88	17.438	17.481	-12.817	1.00	23.16
ATOM	3099	CG2	ILE	88	19.027	15.995	-11.572	1.00	20.50
ATOM	3100	H	ILE	88	19.953	18.439	-14.842	1.00	0.00
ATOM	3101	CD	ILE	88	16.370	16.419	-12.796	1.00	24.85
ATOM	3102	N	ILE	89	22.032	17.687	-11.620	1.00	23.34
ATOM	3103	CA	ILE	89	23.373	17.139	-11.481	1.00	22.63
ATOM	3104	C	ILE	89	23.463	16.186	-10.300	1.00	22.23
ATOM	3105	O	ILE	89	23.388	16.596	-9.140	1.00	22.16
ATOM	3106	CB	ILE	89	24.425	18.255	-11.399	1.00	22.65
ATOM	3107	CG1	ILE	89	24.535	18.926	-12.769	1.00	22.29
ATOM	3108	CG2	ILE	89	25.770	17.695	-10.969	1.00	22.49
ATOM	3109	H	ILE	89	21.661	18.228	-10.916	1.00	0.00
ATOM	3110	CD	ILE	89	25.457	20.087	-12.806	1.00	25.72
ATOM	3111	N	VAL	90	23.561	14.901	-10.629	1.00	21.11
ATOM	3112	CA	VAL	90	23.642	13.825	-9.652	1.00	18.37
ATOM	3113	C	VAL	90	25.093	13.402	-9.491	1.00	16.51
ATOM	3114	O	VAL	90	25.788	13.168	-10.480	1.00	14.67
ATOM	3115	CB	VAL	90	22.807	12.613	-10.112	1.00	17.30
ATOM	3116	CG1	VAL	90	22.950	11.458	-9.139	1.00	19.21
ATOM	3117	CG2	VAL	90	21.356	13.007	-10.240	1.00	17.04
ATOM	3118	H	VAL	90	23.611	14.677	-11.581	1.00	0.00
ATOM	3119	N	HIS	91	25.550	13.323	-8.245	1.00	14.91
ATOM	3120	CA	HIS	91	26.912	12.927	-7.984	1.00	14.56
ATOM	3121	C	HIS	91	27.140	11.568	-8.620	1.00	16.19
ATOM	3122	O	HIS	91	26.495	10.587	-8.261	1.00	17.08
ATOM	3123	CB	HIS	91	27.180	12.852	-6.491	1.00	14.24
ATOM	3124	CG	HIS	91	28.632	12.716	-6.158	1.00	13.82
ATOM	3125	ND1	HIS	91	29.425	13.794	-5.824	1.00	14.00
ATOM	3126	CD2	HIS	91	29.446	11.635	-6.144	1.00	12.66
ATOM	3127	CE1	HIS	91	30.661	13.384	-5.618	1.00	12.98
ATOM	3128	NE2	HIS	91	30.700	12.078	-5.807	1.00	13.51
ATOM	3129	H	HIS	91	24.957	13.508	-7.484	1.00	0.00
ATOM	3130	HD1	HIS	91	29.117	14.726	-5.748	1.00	0.00

ATOM	3131	HE2	HIS	91	31.515	11.538	-5.714	1.00	0.00
ATOM	3132	N	PRO	92	28.130	11.478	-9.513	1.00	17.82
ATOM	3133	CA	PRO	92	28.496	10.255	-10.239	1.00	17.81
ATOM	3134	C	PRO	92	28.666	8.970	-9.442	1.00	17.65
ATOM	3135	O	PRO	92	28.420	7.893	-9.970	1.00	19.34
ATOM	3136	CB	PRO	92	29.791	10.648	-10.956	1.00	17.26
ATOM	3137	CG	PRO	92	30.326	11.790	-10.127	1.00	18.76
ATOM	3138	CD	PRO	92	29.086	12.560	-9.803	1.00	18.30
ATOM	3139	N	GLN	93	29.092	9.065	-8.190	1.00	17.14
ATOM	3140	CA	GLN	93	29.292	7.863	-7.392	1.00	18.42
ATOM	3141	C	GLN	93	28.035	7.359	-6.739	1.00	18.03
ATOM	3142	O	GLN	93	28.070	6.372	-6.005	1.00	19.16
ATOM	3143	CB	GLN	93	30.350	8.084	-6.318	1.00	22.02
ATOM	3144	CG	GLN	93	31.728	8.382	-6.864	1.00	28.17
ATOM	3145	CD	GLN	93	32.828	7.919	-5.935	1.00	31.41
ATOM	3146	OE1	GLN	93	33.531	6.946	-6.227	1.00	33.61
ATOM	3147	NE2	GLN	93	32.981	8.605	-4.804	1.00	32.92
ATOM	3148	H	GLN	93	29.242	9.942	-7.818	1.00	0.00
ATOM	3149	HE21	GLN	93	32.406	9.350	-4.576	1.00	0.00
ATOM	3150	HE22	GLN	93	33.719	8.285	-4.245	1.00	0.00
ATOM	3151	N	PHE	94	26.922	8.030	-6.995	1.00	17.80
ATOM	3152	CA	PHE	94	25.674	7.621	-6.389	1.00	17.79
ATOM	3153	C	PHE	94	24.954	6.511	-7.102	1.00	17.90
ATOM	3154	O	PHE	94	24.847	6.509	-8.322	1.00	19.86
ATOM	3155	CB	PHE	94	24.700	8.786	-6.259	1.00	18.50
ATOM	3156	CG	PHE	94	23.375	8.384	-5.676	1.00	20.01
ATOM	3157	CD1	PHE	94	23.276	8.011	-4.336	1.00	20.50
ATOM	3158	CD2	PHE	94	22.238	8.316	-6.472	1.00	21.38
ATOM	3159	CE1	PHE	94	22.073	7.571	-3.803	1.00	19.68
ATOM	3160	CE2	PHE	94	21.025	7.876	-5.942	1.00	21.21
ATOM	3161	CZ	PHE	94	20.949	7.504	-4.606	1.00	20.25
ATOM	3162	H	PHE	94	26.870	8.777	-7.617	1.00	0.00
ATOM	3163	N	TYR	95	24.429	5.587	-6.312	1.00	18.03
ATOM	3164	CA	TYR	95	23.629	4.479	-6.813	1.00	18.49
ATOM	3165	C	TYR	95	22.711	3.996	-5.689	1.00	17.84
ATOM	3166	O	TYR	95	21.598	3.548	-5.936	1.00	19.19
ATOM	3167	CB	TYR	95	24.473	3.310	-7.346	1.00	20.03
ATOM	3168	CG	TYR	95	23.590	2.189	-7.867	1.00	22.55
ATOM	3169	CD1	TYR	95	22.914	2.313	-9.086	1.00	23.53
ATOM	3170	CD2	TYR	95	23.324	1.063	-7.085	1.00	22.97
ATOM	3171	CE1	TYR	95	21.986	1.352	-9.506	1.00	23.67
ATOM	3172	CE2	TYR	95	22.397	0.098	-7.495	1.00	23.89
ATOM	3173	CZ	TYR	95	21.730	0.251	-8.702	1.00	24.25
ATOM	3174	OH	TYR	95	20.796	-0.688	-9.082	1.00	25.15
ATOM	3175	H	TYR	95	24.612	5.705	-5.360	1.00	0.00
ATOM	3176	HH	TYR	95	20.347	-0.398	-9.893	1.00	0.00
ATOM	3177	N	THR	96	23.174	4.120	-4.451	1.00	16.68
ATOM	3178	CA	THR	96	22.410	3.696	-3.289	1.00	14.87
ATOM	3179	C	THR	96	22.768	4.584	-2.106	1.00	15.76
ATOM	3180	O	THR	96	23.901	5.050	-1.991	1.00	16.26
ATOM	3181	CB	THR	96	22.732	2.229	-2.947	1.00	14.73
ATOM	3182	OG1	THR	96	21.909	1.357	-3.725	1.00	16.07
ATOM	3183	CG2	THR	96	22.526	1.948	-1.499	1.00	14.86
ATOM	3184	H	THR	96	24.069	4.484	-4.291	1.00	0.00
ATOM	3185	HG1	THR	96	20.987	1.624	-3.669	1.00	0.00
ATOM	3186	N	ALA	97	21.799	4.816	-1.229	1.00	16.38
ATOM	3187	CA	ALA	97	22.018	5.638	-0.048	1.00	16.61
ATOM	3188	C	ALA	97	23.063	5.003	0.871	1.00	18.45
ATOM	3189	O	ALA	97	24.058	5.629	1.208	1.00	20.27
ATOM	3190	CB	ALA	97	20.715	5.828	0.698	1.00	16.35
ATOM	3191	H	ALA	97	20.919	4.418	-1.380	1.00	0.00
ATOM	3192	N	GLN	98	22.862	3.734	1.220	1.00	20.21
ATOM	3193	CA	GLN	98	23.764	2.996	2.117	1.00	21.87

73/176

ATOM	3194	C	GLN	98	25.193	2.980	1.597	1.00	20.81
ATOM	3195	O	GLN	98	26.151	2.835	2.361	1.00	19.93
ATOM	3196	CB	GLN	98	23.295	1.544	2.297	1.00	24.44
ATOM	3197	CG	GLN	98	21.982	1.371	3.035	1.00	27.69
ATOM	3198	CD	GLN	98	20.818	2.007	2.311	1.00	30.78
ATOM	3199	OE1	GLN	98	20.808	2.094	1.084	1.00	31.89
ATOM	3200	NE2	GLN	98	19.836	2.476	3.066	1.00	33.22
ATOM	3201	H	GLN	98	22.113	3.291	0.794	1.00	0.00
ATOM	3202	HE21	GLN	98	19.928	2.360	4.032	1.00	0.00
ATOM	3203	HE22	GLN	98	19.073	2.895	2.610	1.00	0.00
ATOM	3204	N	ILE	99	25.317	3.046	0.280	1.00	20.30
ATOM	3205	CA	ILE	99	26.611	3.052	-0.358	1.00	21.90
ATOM	3206	C	ILE	99	27.280	4.406	-0.124	1.00	23.75
ATOM	3207	O	ILE	99	28.421	4.453	0.332	1.00	26.39
ATOM	3208	CB	ILE	99	26.480	2.689	-1.850	1.00	21.91
ATOM	3209	CG1	ILE	99	26.382	1.166	-1.985	1.00	21.54
ATOM	3210	CG2	ILE	99	27.633	3.255	-2.653	1.00	24.65
ATOM	3211	H	ILE	99	24.518	3.118	-0.269	1.00	0.00
ATOM	3212	CD	ILE	99	26.231	0.657	-3.394	1.00	19.95
ATOM	3213	N	GLY	100	26.570	5.498	-0.401	1.00	23.83
ATOM	3214	CA	GLY	100	27.129	6.822	-0.174	1.00	21.64
ATOM	3215	C	GLY	100	26.976	7.786	-1.333	1.00	20.52
ATOM	3216	O	GLY	100	26.308	7.494	-2.325	1.00	19.73
ATOM	3217	H	GLY	100	25.683	5.438	-0.817	1.00	0.00
ATOM	3218	N	ALA	101	27.577	8.960	-1.186	1.00	20.72
ATOM	3219	CA	ALA	101	27.542	9.994	-2.211	1.00	20.27
ATOM	3220	C	ALA	101	26.154	10.540	-2.481	1.00	19.41
ATOM	3221	O	ALA	101	25.931	11.192	-3.496	1.00	21.65
ATOM	3222	CB	ALA	101	28.158	9.477	-3.505	1.00	19.99
ATOM	3223	H	ALA	101	28.094	9.152	-0.370	1.00	0.00
ATOM	3224	N	ASP	102	25.240	10.343	-1.544	1.00	17.49
ATOM	3225	CA	ASP	102	23.873	10.806	-1.724	1.00	15.51
ATOM	3226	C	ASP	102	23.738	12.320	-1.696	1.00	15.17
ATOM	3227	O	ASP	102	23.385	12.902	-0.676	1.00	15.11
ATOM	3228	CB	ASP	102	22.974	10.197	-0.660	1.00	15.37
ATOM	3229	CG	ASP	102	21.526	10.219	-1.048	1.00	16.45
ATOM	3230	OD1	ASP	102	21.174	10.789	-2.096	1.00	16.31
ATOM	3231	OD2	ASP	102	20.719	9.642	-0.306	1.00	19.62
ATOM	3232	H	ASP	102	25.491	9.899	-0.710	1.00	0.00
ATOM	3233	N	ILE	103	23.992	12.957	-2.829	1.00	14.64
ATOM	3234	CA	ILE	103	23.890	14.404	-2.921	1.00	14.84
ATOM	3235	C	ILE	103	23.626	14.746	-4.389	1.00	15.54
ATOM	3236	O	ILE	103	24.140	14.065	-5.292	1.00	15.63
ATOM	3237	CB	ILE	103	25.195	15.082	-2.384	1.00	15.38
ATOM	3238	CG1	ILE	103	24.935	16.540	-1.988	1.00	14.76
ATOM	3239	CG2	ILE	103	26.327	14.967	-3.404	1.00	14.78
ATOM	3240	H	ILE	103	24.286	12.439	-3.609	1.00	0.00
ATOM	3241	CD	ILE	103	26.094	17.201	-1.268	1.00	11.34
ATOM	3242	N	ALA	104	22.785	15.753	-4.623	1.00	15.37
ATOM	3243	CA	ALA	104	22.428	16.178	-5.976	1.00	15.05
ATOM	3244	C	ALA	104	22.124	17.660	-6.019	1.00	15.32
ATOM	3245	O	ALA	104	21.809	18.263	-4.996	1.00	16.76
ATOM	3246	CB	ALA	104	21.236	15.399	-6.472	1.00	15.24
ATOM	3247	H	ALA	104	22.358	16.234	-3.890	1.00	0.00
ATOM	3248	N	LEU	105	22.200	18.228	-7.215	1.00	15.71
ATOM	3249	CA	LEU	105	21.960	19.646	-7.442	1.00	17.31
ATOM	3250	C	LEU	105	20.948	19.862	-8.561	1.00	19.06
ATOM	3251	O	LEU	105	21.033	19.222	-9.611	1.00	19.06
ATOM	3252	CB	LEU	105	23.262	20.328	-7.868	1.00	17.05
ATOM	3253	CG	LEU	105	24.444	20.403	-6.910	1.00	16.15
ATOM	3254	CD1	LEU	105	25.683	20.853	-7.669	1.00	15.03
ATOM	3255	CD2	LEU	105	24.113	21.362	-5.777	1.00	16.80
ATOM	3256	H	LEU	105	22.468	17.677	-7.971	1.00	0.00

74/176

ATOM	3257	N	LEU	106	20.015	20.784	-8.354	1.00	18.81
ATOM	3258	CA	LEU	106	19.022	21.095	-9.369	1.00	18.38
ATOM	3259	C	LEU	106	19.249	22.552	-9.721	1.00	19.95
ATOM	3260	O	LEU	106	19.358	23.389	-8.827	1.00	20.25
ATOM	3261	CB	LEU	106	17.613	20.923	-8.818	1.00	18.45
ATOM	3262	CG	LEU	106	17.302	19.714	-7.932	1.00	19.10
ATOM	3263	CD1	LEU	106	15.795	19.581	-7.795	1.00	19.66
ATOM	3264	CD2	LEU	106	17.867	18.445	-8.518	1.00	20.28
ATOM	3265	H	LEU	106	20.026	21.246	-7.491	1.00	0.00
ATOM	3266	N	GLU	107	19.400	22.844	-11.006	1.00	21.93
ATOM	3267	CA	GLU	107	19.623	24.215	-11.452	1.00	24.66
ATOM	3268	C	GLU	107	18.293	24.778	-11.904	1.00	25.13
ATOM	3269	O	GLU	107	17.572	24.129	-12.664	1.00	26.66
ATOM	3270	CB	GLU	107	20.631	24.252	-12.614	1.00	26.28
ATOM	3271	CG	GLU	107	20.927	25.657	-13.160	1.00	27.29
ATOM	3272	CD	GLU	107	21.953	25.661	-14.289	1.00	29.17
ATOM	3273	OE1	GLU	107	22.959	26.386	-14.187	1.00	30.52
ATOM	3274	OE2	GLU	107	21.777	24.940	-15.293	1.00	31.23
ATOM	3275	H	GLU	107	19.378	22.140	-11.669	1.00	0.00
ATOM	3276	N	LEU	108	17.948	25.966	-11.422	1.00	23.99
ATOM	3277	CA	LEU	108	16.689	26.587	-11.803	1.00	24.64
ATOM	3278	C	LEU	108	16.868	27.234	-13.171	1.00	29.15
ATOM	3279	O	LEU	108	17.994	27.557	-13.555	1.00	30.56
ATOM	3280	CB	LEU	108	16.282	27.628	-10.766	1.00	20.08
ATOM	3281	CG	LEU	108	16.096	27.099	-9.345	1.00	17.40
ATOM	3282	CD1	LEU	108	15.604	28.210	-8.446	1.00	17.94
ATOM	3283	CD2	LEU	108	15.110	25.953	-9.327	1.00	15.86
ATOM	3284	H	LEU	108	18.597	26.433	-10.858	1.00	0.00
ATOM	3285	N	GLU	109	15.783	27.393	-13.925	1.00	34.05
ATOM	3286	CA	GLU	109	15.878	28.014	-15.249	1.00	39.14
ATOM	3287	C	GLU	109	16.218	29.495	-15.112	1.00	41.66
ATOM	3288	O	GLU	109	16.942	30.053	-15.934	1.00	42.60
ATOM	3289	CB	GLU	109	14.579	27.842	-16.047	1.00	41.87
ATOM	3290	CG	GLU	109	14.169	26.380	-16.270	1.00	47.69
ATOM	3291	CD	GLU	109	14.120	25.960	-17.742	1.00	50.47
ATOM	3292	OE1	GLU	109	13.324	25.050	-18.074	1.00	51.05
ATOM	3293	OE2	GLU	109	14.887	26.517	-18.561	1.00	51.80
ATOM	3294	H	GLU	109	14.908	27.060	-13.609	1.00	0.00
ATOM	3295	N	GLU	110	15.729	30.114	-14.045	1.00	44.14
ATOM	3296	CA	GLU	110	15.978	31.528	-13.784	1.00	47.55
ATOM	3297	C	GLU	110	16.286	31.701	-12.299	1.00	48.50
ATOM	3298	O	GLU	110	15.821	30.916	-11.467	1.00	49.30
ATOM	3299	CB	GLU	110	14.744	32.357	-14.154	1.00	50.55
ATOM	3300	CG	GLU	110	13.481	31.919	-13.414	1.00	54.94
ATOM	3301	CD	GLU	110	12.254	32.729	-13.785	1.00	56.79
ATOM	3302	OE1	GLU	110	11.801	33.542	-12.950	1.00	58.86
ATOM	3303	OE2	GLU	110	11.732	32.540	-14.904	1.00	57.42
ATOM	3304	H	GLU	110	15.183	29.613	-13.398	1.00	0.00
ATOM	3305	N	PRO	111	17.128	32.687	-11.952	1.00	48.50
ATOM	3306	CA	PRO	111	17.479	32.931	-10.550	1.00	48.59
ATOM	3307	C	PRO	111	16.286	33.490	-9.783	1.00	49.59
ATOM	3308	O	PRO	111	15.459	34.215	-10.342	1.00	49.69
ATOM	3309	CB	PRO	111	18.594	33.971	-10.653	1.00	48.14
ATOM	3310	CG	PRO	111	19.174	33.734	-12.013	1.00	48.12
ATOM	3311	CD	PRO	111	17.945	33.522	-12.845	1.00	48.37
ATOM	3312	N	VAL	112	16.201	33.153	-8.505	1.00	50.84
ATOM	3313	CA	VAL	112	15.110	33.622	-7.668	1.00	53.38
ATOM	3314	C	VAL	112	15.533	34.865	-6.901	1.00	56.72
ATOM	3315	O	VAL	112	16.601	34.887	-6.287	1.00	58.71
ATOM	3316	CB	VAL	112	14.653	32.536	-6.664	1.00	52.88
ATOM	3317	CG1	VAL	112	14.176	31.304	-7.407	1.00	53.74
ATOM	3318	CG2	VAL	112	15.776	32.173	-5.708	1.00	52.31
ATOM	3319	H	VAL	112	16.926	32.607	-8.142	1.00	0.00

75/176

ATOM	3320	N	LYS	113	14.722	35.917	-6.970	1.00	58.96
ATOM	3321	CA	LYS	113	15.022	37.152	-6.248	1.00	60.41
ATOM	3322	C	LYS	113	14.853	36.838	-4.765	1.00	60.77
ATOM	3323	O	LYS	113	13.757	36.967	-4.216	1.00	61.43
ATOM	3324	CB	LYS	113	14.057	38.276	-6.647	1.00	61.58
ATOM	3325	CG	LYS	113	13.890	38.485	-8.147	1.00	63.29
ATOM	3326	CD	LYS	113	12.543	37.954	-8.629	1.00	65.05
ATOM	3327	CE	LYS	113	11.376	38.698	-7.973	1.00	65.70
ATOM	3328	NZ	LYS	113	10.048	38.167	-8.401	1.00	66.27
ATOM	3329	H	LYS	113	13.925	35.825	-7.520	1.00	0.00
ATOM	3330	HZ1	LYS	113	9.962	37.166	-8.136	1.00	0.00
ATOM	3331	HZ2	LYS	113	9.955	38.272	-9.432	1.00	0.00
ATOM	3332	HZ3	LYS	113	9.304	38.717	-7.925	1.00	0.00
ATOM	3333	N	VAL	114	15.925	36.360	-4.147	1.00	60.71
ATOM	3334	CA	VAL	114	15.908	36.001	-2.738	1.00	60.67
ATOM	3335	C	VAL	114	15.500	37.157	-1.829	1.00	60.65
ATOM	3336	O	VAL	114	16.274	38.086	-1.592	1.00	60.82
ATOM	3337	CB	VAL	114	17.264	35.410	-2.300	1.00	61.10
ATOM	3338	CG1	VAL	114	17.445	34.025	-2.915	1.00	61.42
ATOM	3339	CG2	VAL	114	18.408	36.323	-2.726	1.00	61.09
ATOM	3340	H	VAL	114	16.737	36.214	-4.674	1.00	0.00
ATOM	3341	N	SER	115	14.267	37.102	-1.340	1.00	61.08
ATOM	3342	CA	SER	115	13.732	38.139	-0.466	1.00	61.41
ATOM	3343	C	SER	115	13.957	37.844	1.021	1.00	61.79
ATOM	3344	O	SER	115	14.564	36.829	1.387	1.00	62.53
ATOM	3345	CB	SER	115	12.238	38.347	-0.752	1.00	60.84
ATOM	3346	OG	SER	115	11.484	37.178	-0.475	1.00	60.27
ATOM	3347	H	SER	115	13.706	36.338	-1.597	1.00	0.00
ATOM	3348	HG	SER	115	11.199	37.174	0.429	1.00	0.00
ATOM	3349	N	SER	116	13.436	38.720	1.876	1.00	61.44
ATOM	3350	CA	SER	116	13.566	38.573	3.325	1.00	61.01
ATOM	3351	C	SER	116	12.974	37.259	3.839	1.00	59.89
ATOM	3352	O	SER	116	13.434	36.709	4.844	1.00	58.72
ATOM	3353	CB	SER	116	12.889	39.756	4.028	1.00	61.11
ATOM	3354	OG	SER	116	11.542	39.897	3.604	1.00	61.47
ATOM	3355	H	SER	116	12.965	39.513	1.546	1.00	0.00
ATOM	3356	HG	SER	116	11.260	40.769	3.917	1.00	0.00
ATOM	3357	N	HIS	117	11.971	36.753	3.129	1.00	59.62
ATOM	3358	CA	HIS	117	11.302	35.514	3.517	1.00	59.34
ATOM	3359	C	HIS	117	11.737	34.297	2.695	1.00	56.48
ATOM	3360	O	HIS	117	11.407	33.165	3.050	1.00	56.61
ATOM	3361	CB	HIS	117	9.776	35.680	3.430	1.00	63.09
ATOM	3362	CG	HIS	117	9.255	36.924	4.090	1.00	66.88
ATOM	3363	ND1	HIS	117	9.417	37.184	5.436	1.00	67.62
ATOM	3364	CD2	HIS	117	8.580	37.985	3.583	1.00	67.79
ATOM	3365	CE1	HIS	117	8.866	38.349	5.728	1.00	68.20
ATOM	3366	NE2	HIS	117	8.352	38.855	4.622	1.00	68.20
ATOM	3367	H	HIS	117	11.705	37.219	2.318	1.00	0.00
ATOM	3368	HD1	HIS	117	9.878	36.624	6.106	1.00	0.00
ATOM	3369	HE2	HIS	117	7.875	39.714	4.550	1.00	0.00
ATOM	3370	N	VAL	118	12.467	34.527	1.604	1.00	52.48
ATOM	3371	CA	VAL	118	12.937	33.444	0.739	1.00	48.37
ATOM	3372	C	VAL	118	14.356	33.705	0.246	1.00	46.52
ATOM	3373	O	VAL	118	14.562	34.432	-0.721	1.00	45.40
ATOM	3374	CB	VAL	118	12.004	33.257	-0.480	1.00	46.79
ATOM	3375	CG1	VAL	118	12.673	32.415	-1.553	1.00	46.40
ATOM	3376	CG2	VAL	118	10.720	32.593	-0.041	1.00	46.79
ATOM	3377	H	VAL	118	12.723	35.429	1.328	1.00	0.00
ATOM	3378	N	HIS	119	15.334	33.121	0.927	1.00	45.06
ATOM	3379	CA	HIS	119	16.725	33.294	0.536	1.00	43.51
ATOM	3380	C	HIS	119	17.584	32.079	0.860	1.00	41.34
ATOM	3381	O	HIS	119	17.141	31.157	1.547	1.00	41.25
ATOM	3382	CB	HIS	119	17.328	34.578	1.126	1.00	44.71

26/126

ATOM	3383	CG	HIS	119	17.256	34.664	2.618	1.00	45.16
ATOM	3384	ND1	HIS	119	16.287	35.392	3.273	1.00	45.96
ATOM	3385	CD2	HIS	119	18.054	34.148	3.582	1.00	46.03
ATOM	3386	CE1	HIS	119	16.490	35.324	4.576	1.00	47.16
ATOM	3387	NE2	HIS	119	17.558	34.575	4.790	1.00	47.71
ATOM	3388	H	HIS	119	15.120	32.488	1.647	1.00	0.00
ATOM	3389	HD1	HIS	119	15.585	35.902	2.803	1.00	0.00
ATOM	3390	HE2	HIS	119	17.950	34.357	5.664	1.00	0.00
ATOM	3391	N	THR	120	18.819	32.106	0.372	1.00	38.34
ATOM	3392	CA	THR	120	19.766	31.013	0.541	1.00	34.55
ATOM	3393	C	THR	120	20.300	30.749	1.943	1.00	32.22
ATOM	3394	O	THR	120	20.341	31.640	2.790	1.00	33.28
ATOM	3395	CB	THR	120	20.957	31.205	-0.399	1.00	33.14
ATOM	3396	OG1	THR	120	21.644	32.412	-0.057	1.00	31.99
ATOM	3397	CG2	THR	120	20.468	31.317	-1.823	1.00	31.97
ATOM	3398	H	THR	120	19.128	32.885	-0.127	1.00	0.00
ATOM	3399	HG1	THR	120	21.164	33.191	-0.368	1.00	0.00
ATOM	3400	N	VAL	121	20.679	29.497	2.181	1.00	29.15
ATOM	3401	CA	VAL	121	21.254	29.085	3.452	1.00	27.82
ATOM	3402	C	VAL	121	22.755	29.234	3.250	1.00	28.37
ATOM	3403	O	VAL	121	23.207	29.538	2.145	1.00	28.69
ATOM	3404	CB	VAL	121	20.902	27.613	3.795	1.00	26.96
ATOM	3405	CG1	VAL	121	21.481	26.673	2.764	1.00	27.49
ATOM	3406	CG2	VAL	121	21.379	27.247	5.196	1.00	24.97
ATOM	3407	H	VAL	121	20.573	28.879	1.433	1.00	0.00
ATOM	3408	N	THR	122	23.532	29.039	4.303	1.00	29.72
ATOM	3409	CA	THR	122	24.969	29.171	4.183	1.00	31.59
ATOM	3410	C	THR	122	25.618	27.802	4.349	1.00	32.19
ATOM	3411	O	THR	122	25.270	27.053	5.269	1.00	32.90
ATOM	3412	CB	THR	122	25.516	30.143	5.246	1.00	33.10
ATOM	3413	OG1	THR	122	24.646	31.280	5.354	1.00	34.19
ATOM	3414	CG2	THR	122	26.904	30.624	4.855	1.00	33.93
ATOM	3415	H	THR	122	23.207	28.833	5.203	1.00	0.00
ATOM	3416	HG1	THR	122	23.766	31.001	5.612	1.00	0.00
ATOM	3417	N	LEU	123	26.515	27.452	3.430	1.00	31.53
ATOM	3418	CA	LEU	123	27.209	26.167	3.496	1.00	31.02
ATOM	3419	C	LEU	123	28.322	26.220	4.548	1.00	31.62
ATOM	3420	O	LEU	123	29.049	27.204	4.661	1.00	32.50
ATOM	3421	CB	LEU	123	27.773	25.771	2.121	1.00	29.42
ATOM	3422	CG	LEU	123	26.790	25.351	1.019	1.00	26.99
ATOM	3423	CD1	LEU	123	27.539	25.158	-0.291	1.00	25.06
ATOM	3424	CD2	LEU	123	26.053	24.076	1.416	1.00	24.67
ATOM	3425	H	LEU	123	26.732	28.064	2.703	1.00	0.00
ATOM	3426	N	PRO	124	28.448	25.164	5.354	1.00	32.64
ATOM	3427	CA	PRO	124	29.466	25.094	6.400	1.00	34.01
ATOM	3428	C	PRO	124	30.865	25.195	5.836	1.00	35.14
ATOM	3429	O	PRO	124	31.122	24.755	4.725	1.00	34.65
ATOM	3430	CB	PRO	124	29.232	23.711	6.998	1.00	33.70
ATOM	3431	CG	PRO	124	28.733	22.933	5.818	1.00	32.32
ATOM	3432	CD	PRO	124	27.740	23.882	5.238	1.00	32.80
ATOM	3433	N	PRO	125	31.782	25.814	6.585	1.00	37.49
ATOM	3434	CA	PRO	125	33.155	25.934	6.103	1.00	39.11
ATOM	3435	C	PRO	125	33.768	24.534	6.072	1.00	40.69
ATOM	3436	O	PRO	125	33.358	23.655	6.828	1.00	39.70
ATOM	3437	CB	PRO	125	33.806	26.813	7.168	1.00	38.93
ATOM	3438	CG	PRO	125	33.057	26.451	8.404	1.00	38.22
ATOM	3439	CD	PRO	125	31.637	26.440	7.907	1.00	38.30
ATOM	3440	N	ALA	126	34.750	24.340	5.202	1.00	43.31
ATOM	3441	CA	ALA	126	35.410	23.048	5.054	1.00	46.91
ATOM	3442	C	ALA	126	35.841	22.416	6.378	1.00	49.80
ATOM	3443	O	ALA	126	35.583	21.238	6.633	1.00	49.92
ATOM	3444	CB	ALA	126	36.606	23.185	4.121	1.00	47.29
ATOM	3445	H	ALA	126	35.003	25.084	4.619	1.00	0.00

99/126

ATOM	3446	N	SER	127	36.471	23.220	7.228	1.00	52.56
ATOM	3447	CA	SER	127	36.965	22.758	8.521	1.00	54.03
ATOM	3448	C	SER	127	35.882	22.529	9.567	1.00	53.77
ATOM	3449	O	SER	127	36.141	21.913	10.604	1.00	54.33
ATOM	3450	CB	SER	127	38.012	23.748	9.062	1.00	55.86
ATOM	3451	OG	SER	127	37.547	25.096	9.042	1.00	55.97
ATOM	3452	H	SER	127	36.613	24.162	7.017	1.00	0.00
ATOM	3453	HG	SER	127	36.899	25.219	9.754	1.00	0.00
ATOM	3454	N	GLU	128	34.667	22.982	9.283	1.00	53.27
ATOM	3455	CA	GLU	128	33.584	22.845	10.242	1.00	52.57
ATOM	3456	C	GLU	128	33.379	21.431	10.738	1.00	51.46
ATOM	3457	O	GLU	128	33.433	20.464	9.974	1.00	51.06
ATOM	3458	CB	GLU	128	32.280	23.412	9.694	1.00	53.36
ATOM	3459	CG	GLU	128	31.271	23.725	10.784	1.00	54.12
ATOM	3460	CD	GLU	128	31.896	24.467	11.957	1.00	53.62
ATOM	3461	OE1	GLU	128	32.412	25.586	11.755	1.00	53.92
ATOM	3462	OE2	GLU	128	31.892	23.916	13.076	1.00	54.19
ATOM	3463	H	GLU	128	34.461	23.358	8.410	1.00	0.00
ATOM	3464	N	THR	129	33.158	21.330	12.039	1.00	50.59
ATOM	3465	CA	THR	129	32.957	20.056	12.697	1.00	50.23
ATOM	3466	C	THR	129	31.897	20.296	13.752	1.00	48.52
ATOM	3467	O	THR	129	32.040	21.174	14.607	1.00	49.08
ATOM	3468	CB	THR	129	34.258	19.566	13.375	1.00	51.98
ATOM	3469	OG1	THR	129	35.310	19.488	12.403	1.00	52.92
ATOM	3470	CG2	THR	129	34.047	18.191	14.005	1.00	53.49
ATOM	3471	H	THR	129	33.075	22.147	12.589	1.00	0.00
ATOM	3472	HG1	THR	129	35.517	20.322	11.951	1.00	0.00
ATOM	3473	N	PHE	130	30.828	19.517	13.687	1.00	45.94
ATOM	3474	CA	PHE	130	29.729	19.646	14.626	1.00	42.95
ATOM	3475	C	PHE	130	29.930	18.670	15.774	1.00	41.42
ATOM	3476	O	PHE	130	29.925	17.448	15.588	1.00	41.86
ATOM	3477	CB	PHE	130	28.408	19.423	13.889	1.00	41.39
ATOM	3478	CG	PHE	130	28.266	20.285	12.672	1.00	39.34
ATOM	3479	CD1	PHE	130	29.033	20.029	11.535	1.00	38.47
ATOM	3480	CD2	PHE	130	27.435	21.400	12.681	1.00	38.73
ATOM	3481	CE1	PHE	130	28.977	20.874	10.429	1.00	38.13
ATOM	3482	CE2	PHE	130	27.375	22.247	11.576	1.00	38.62
ATOM	3483	CZ	PHE	130	28.149	21.985	10.452	1.00	37.77
ATOM	3484	H	PHE	130	30.776	18.819	13.005	1.00	0.00
ATOM	3485	N	PRO	131	30.188	19.205	16.974	1.00	39.65
ATOM	3486	CA	PRO	131	30.415	18.422	18.191	1.00	39.34
ATOM	3487	C	PRO	131	29.215	17.585	18.606	1.00	37.64
ATOM	3488	O	PRO	131	28.074	18.028	18.509	1.00	36.77
ATOM	3489	CB	PRO	131	30.736	19.497	19.230	1.00	40.21
ATOM	3490	CG	PRO	131	29.932	20.666	18.755	1.00	40.85
ATOM	3491	CD	PRO	131	30.192	20.647	17.272	1.00	39.74
ATOM	3492	N	PRO	132	29.466	16.377	19.121	1.00	37.42
ATOM	3493	CA	PRO	132	28.375	15.504	19.550	1.00	37.72
ATOM	3494	C	PRO	132	27.533	16.249	20.565	1.00	38.37
ATOM	3495	O	PRO	132	28.054	17.001	21.398	1.00	38.89
ATOM	3496	CB	PRO	132	29.112	14.327	20.184	1.00	37.73
ATOM	3497	CG	PRO	132	30.364	14.965	20.711	1.00	37.59
ATOM	3498	CD	PRO	132	30.766	15.844	19.563	1.00	37.40
ATOM	3499	N	GLY	133	26.225	16.077	20.479	1.00	39.47
ATOM	3500	CA	GLY	133	25.351	16.763	21.399	1.00	41.19
ATOM	3501	C	GLY	133	24.882	18.096	20.850	1.00	42.36
ATOM	3502	O	GLY	133	23.771	18.519	21.172	1.00	44.14
ATOM	3503	H	GLY	133	25.850	15.490	19.787	1.00	0.00
ATOM	3504	N	MET	134	25.701	18.756	20.029	1.00	41.67
ATOM	3505	CA	MET	134	25.311	20.043	19.455	1.00	41.10
ATOM	3506	C	MET	134	23.939	19.873	18.821	1.00	41.05
ATOM	3507	O	MET	134	23.740	19.000	17.968	1.00	41.93
ATOM	3508	CB	MET	134	26.309	20.505	18.395	1.00	41.54

78/176

ATOM	3509	CG	MET	134	25.883	21.760	17.658	1.00	43.25
ATOM	3510	SD	MET	134	27.021	22.197	16.336	1.00	47.72
ATOM	3511	CE	MET	134	27.509	23.857	16.830	1.00	47.53
ATOM	3512	H	MET	134	26.553	18.382	19.728	1.00	0.00
ATOM	3513	N	PRO	135	22.950	20.634	19.302	1.00	39.34
ATOM	3514	CA	PRO	135	21.611	20.507	18.731	1.00	37.12
ATOM	3515	C	PRO	135	21.502	21.224	17.398	1.00	34.98
ATOM	3516	O	PRO	135	21.989	22.345	17.231	1.00	34.48
ATOM	3517	CB	PRO	135	20.730	21.143	19.799	1.00	36.81
ATOM	3518	CG	PRO	135	21.597	22.242	20.312	1.00	39.01
ATOM	3519	CD	PRO	135	22.961	21.584	20.429	1.00	39.13
ATOM	3520	N	CYS	136	20.911	20.537	16.439	1.00	33.50
ATOM	3521	CA	CYS	136	20.695	21.083	15.117	1.00	32.45
ATOM	3522	C	CYS	136	19.210	20.890	14.843	1.00	33.73
ATOM	3523	O	CYS	136	18.495	20.337	15.684	1.00	34.39
ATOM	3524	CB	CYS	136	21.544	20.335	14.098	1.00	30.37
ATOM	3525	SG	CYS	136	23.334	20.503	14.358	1.00	26.22
ATOM	3526	H	CYS	136	20.625	19.625	16.608	1.00	0.00
ATOM	3527	N	TRP	137	18.738	21.344	13.686	1.00	33.94
ATOM	3528	CA	TRP	137	17.324	21.224	13.342	1.00	33.40
ATOM	3529	C	TRP	137	17.145	20.648	11.952	1.00	33.84
ATOM	3530	O	TRP	137	17.884	21.003	11.037	1.00	35.74
ATOM	3531	CB	TRP	137	16.656	22.600	13.352	1.00	33.55
ATOM	3532	CG	TRP	137	16.834	23.404	14.600	1.00	32.89
ATOM	3533	CD1	TRP	137	17.993	23.951	15.072	1.00	32.81
ATOM	3534	CD2	TRP	137	15.809	23.789	15.512	1.00	33.22
ATOM	3535	NE1	TRP	137	17.750	24.657	16.221	1.00	32.46
ATOM	3536	CE2	TRP	137	16.416	24.575	16.515	1.00	32.62
ATOM	3537	CE3	TRP	137	14.431	23.547	15.579	1.00	34.85
ATOM	3538	CZ2	TRP	137	15.696	25.120	17.572	1.00	34.22
ATOM	3539	CZ3	TRP	137	13.709	24.090	16.635	1.00	35.32
ATOM	3540	CH2	TRP	137	14.345	24.869	17.617	1.00	35.81
ATOM	3541	H	TRP	137	19.351	21.782	13.054	1.00	0.00
ATOM	3542	HE1	TRP	137	18.442	25.193	16.667	1.00	0.00
ATOM	3543	N	VAL	138	16.159	19.773	11.796	1.00	34.21
ATOM	3544	CA	VAL	138	15.846	19.179	10.495	1.00	34.78
ATOM	3545	C	VAL	138	14.489	19.779	10.144	1.00	35.19
ATOM	3546	O	VAL	138	13.687	20.056	11.045	1.00	36.78
ATOM	3547	CB	VAL	138	15.679	17.649	10.566	1.00	35.29
ATOM	3548	CG1	VAL	138	15.790	17.049	9.182	1.00	35.55
ATOM	3549	CG2	VAL	138	16.703	17.040	11.485	1.00	37.18
ATOM	3550	H	VAL	138	15.622	19.557	12.586	1.00	0.00
ATOM	3551	N	THR	139	14.216	19.972	8.859	1.00	33.49
ATOM	3552	CA	THR	139	12.941	20.562	8.461	1.00	32.04
ATOM	3553	C	THR	139	12.356	19.855	7.242	1.00	31.06
ATOM	3554	O	THR	139	13.100	19.430	6.354	1.00	31.55
ATOM	3555	CB	THR	139	13.110	22.066	8.140	1.00	32.20
ATOM	3556	OG1	THR	139	14.107	22.641	8.995	1.00	32.70
ATOM	3557	CG2	THR	139	11.811	22.795	8.374	1.00	34.44
ATOM	3558	H	THR	139	14.870	19.715	8.173	1.00	0.00
ATOM	3559	HG1	THR	139	14.890	22.078	8.934	1.00	0.00
ATOM	3560	N	GLY	140	11.030	19.740	7.194	1.00	29.01
ATOM	3561	CA	GLY	140	10.390	19.083	6.064	1.00	26.53
ATOM	3562	C	GLY	140	8.877	19.000	6.153	1.00	24.44
ATOM	3563	O	GLY	140	8.268	19.568	7.051	1.00	26.54
ATOM	3564	H	GLY	140	10.475	20.083	7.932	1.00	0.00
ATOM	3565	N	TRP	141	8.272	18.301	5.200	1.00	21.59
ATOM	3566	CA	TRP	141	6.822	18.122	5.138	1.00	18.01
ATOM	3567	C	TRP	141	6.544	16.627	5.042	1.00	17.35
ATOM	3568	O	TRP	141	5.624	16.201	4.334	1.00	17.29
ATOM	3569	CB	TRP	141	6.256	18.778	3.875	1.00	15.10
ATOM	3570	CG	TRP	141	6.260	20.267	3.834	1.00	13.29
ATOM	3571	CD1	TRP	141	5.328	21.097	4.379	1.00	13.90

79/176

ATOM	3572	CD2	TRP	141	7.169	21.107	3.106	1.00	12.66
ATOM	3573	NE1	TRP	141	5.589	22.399	4.023	1.00	13.85
ATOM	3574	CE2	TRP	141	6.712	22.434	3.244	1.00	11.73
ATOM	3575	CE3	TRP	141	8.318	20.866	2.345	1.00	13.90
ATOM	3576	CZ2	TRP	141	7.360	23.514	2.650	1.00	11.79
ATOM	3577	CZ3	TRP	141	8.968	21.944	1.751	1.00	13.55
ATOM	3578	CH2	TRP	141	8.486	23.250	1.909	1.00	13.61
ATOM	3579	H	TRP	141	8.847	17.848	4.553	1.00	0.00
ATOM	3580	HE1	TRP	141	5.064	23.185	4.278	1.00	0.00
ATOM	3581	N	GLY	142	7.375	15.828	5.699	1.00	16.09
ATOM	3582	CA	GLY	142	7.202	14.392	5.637	1.00	16.14
ATOM	3583	C	GLY	142	6.307	13.802	6.702	1.00	17.47
ATOM	3584	O	GLY	142	5.665	14.520	7.469	1.00	18.32
ATOM	3585	H	GLY	142	8.113	16.160	6.259	1.00	0.00
ATOM	3586	N	ASP	143	6.272	12.475	6.735	1.00	18.35
ATOM	3587	CA	ASP	143	5.479	11.720	7.690	1.00	19.12
ATOM	3588	C	ASP	143	5.818	12.116	9.115	1.00	20.80
ATOM	3589	O	ASP	143	6.978	12.380	9.446	1.00	20.56
ATOM	3590	CB	ASP	143	5.728	10.217	7.527	1.00	19.03
ATOM	3591	CG	ASP	143	5.233	9.673	6.201	1.00	18.70
ATOM	3592	OD1	ASP	143	4.551	10.410	5.448	1.00	19.38
ATOM	3593	OD2	ASP	143	5.529	8.493	5.920	1.00	18.75
ATOM	3594	H	ASP	143	6.807	11.996	6.066	1.00	0.00
ATOM	3595	N	VAL	144	4.800	12.108	9.964	1.00	22.30
ATOM	3596	CA	VAL	144	4.951	12.473	11.358	1.00	23.24
ATOM	3597	C	VAL	144	5.292	11.281	12.236	1.00	25.57
ATOM	3598	O	VAL	144	5.557	11.442	13.426	1.00	26.10
ATOM	3599	CB	VAL	144	3.688	13.143	11.871	1.00	21.79
ATOM	3600	CG1	VAL	144	3.441	14.423	11.094	1.00	21.10
ATOM	3601	CG2	VAL	144	2.509	12.201	11.737	1.00	20.47
ATOM	3602	H	VAL	144	3.953	11.795	9.605	1.00	0.00
ATOM	3603	N	ASP	145	5.271	10.095	11.642	1.00	29.19
ATOM	3604	CA	ASP	145	5.590	8.841	12.325	1.00	34.16
ATOM	3605	C	ASP	145	5.562	7.790	11.220	1.00	36.85
ATOM	3606	O	ASP	145	5.097	8.076	10.114	1.00	38.94
ATOM	3607	CB	ASP	145	4.536	8.513	13.391	1.00	36.58
ATOM	3608	CG	ASP	145	5.024	7.493	14.421	1.00	39.98
ATOM	3609	OD1	ASP	145	5.675	6.493	14.049	1.00	42.07
ATOM	3610	OD2	ASP	145	4.760	7.691	15.624	1.00	41.75
ATOM	3611	H	ASP	145	5.012	10.034	10.696	1.00	0.00
ATOM	3612	N	ASN	146	6.102	6.604	11.484	1.00	37.99
ATOM	3613	CA	ASN	146	6.112	5.531	10.493	1.00	40.65
ATOM	3614	C	ASN	146	4.690	5.290	9.989	1.00	41.93
ATOM	3615	O	ASN	146	3.798	4.951	10.769	1.00	42.73
ATOM	3616	CB	ASN	146	6.684	4.241	11.099	1.00	42.59
ATOM	3617	CG	ASN	146	8.114	4.405	11.593	1.00	44.98
ATOM	3618	OD1	ASN	146	9.078	4.147	10.866	1.00	45.48
ATOM	3619	ND2	ASN	146	8.256	4.858	12.832	1.00	46.50
ATOM	3620	H	ASN	146	6.501	6.482	12.364	1.00	0.00
ATOM	3621	HD21	ASN	146	7.433	5.081	13.338	1.00	0.00
ATOM	3622	HD22	ASN	146	9.151	4.976	13.213	1.00	0.00
ATOM	3623	N	ASP	147	4.483	5.516	8.695	1.00	42.89
ATOM	3624	CA	ASP	147	3.182	5.348	8.051	1.00	43.77
ATOM	3625	C	ASP	147	2.153	6.353	8.526	1.00	43.61
ATOM	3626	O	ASP	147	0.952	6.112	8.441	1.00	45.41
ATOM	3627	CB	ASP	147	2.635	3.929	8.236	1.00	46.19
ATOM	3628	CG	ASP	147	3.266	2.935	7.290	1.00	49.04
ATOM	3629	OD1	ASP	147	3.502	3.289	6.111	1.00	49.80
ATOM	3630	OD2	ASP	147	3.528	1.793	7.727	1.00	50.69
ATOM	3631	H	ASP	147	5.215	5.831	8.129	1.00	0.00
ATOM	3632	N	GLU	149	2.619	7.489	9.017	1.00	42.94
ATOM	3633	CA	GLU	149	1.723	8.527	9.485	1.00	43.32
ATOM	3634	C	GLU	149	1.942	9.752	8.633	1.00	42.86

80/126

ATOM	3635	O	GLU	149	2.821	10.557	8.924	1.00	43.45
ATOM	3636	CB	GLU	149	2.005	8.859	10.942	1.00	45.78
ATOM	3637	CG	GLU	149	1.350	7.925	11.931	1.00	50.19
ATOM	3638	CD	GLU	149	0.491	8.671	12.933	1.00	52.83
ATOM	3639	OE1	GLU	149	-0.392	9.447	12.497	1.00	55.40
ATOM	3640	OE2	GLU	149	0.695	8.488	14.153	1.00	54.00
ATOM	3641	H	GLU	149	3.580	7.654	9.060	1.00	0.00
ATOM	3642	N	ARG	150	1.172	9.876	7.559	1.00	41.94
ATOM	3643	CA	ARG	150	1.294	11.020	6.663	1.00	41.29
ATOM	3644	C	ARG	150	1.051	12.332	7.400	1.00	37.71
ATOM	3645	O	ARG	150	0.392	12.358	8.443	1.00	37.36
ATOM	3646	CB	ARG	150	0.284	10.927	5.514	1.00	45.83
ATOM	3647	CG	ARG	150	0.716	10.127	4.294	1.00	51.41
ATOM	3648	CD	ARG	150	-0.297	10.305	3.142	1.00	56.94
ATOM	3649	NE	ARG	150	-0.309	11.664	2.578	1.00	61.35
ATOM	3650	CZ	ARG	150	-1.307	12.545	2.711	1.00	63.02
ATOM	3651	NH1	ARG	150	-2.406	12.229	3.396	1.00	63.70
ATOM	3652	NH2	ARG	150	-1.203	13.749	2.151	1.00	62.91
ATOM	3653	H	ARG	150	0.511	9.174	7.402	1.00	0.00
ATOM	3654	HE	ARG	150	0.500	11.913	2.079	1.00	0.00
ATOM	3655	HH11	ARG	150	-2.497	11.328	3.827	1.00	0.00
ATOM	3656	HH12	ARG	150	-3.179	12.853	3.521	1.00	0.00
ATOM	3657	HH21	ARG	150	-0.397	14.023	1.608	1.00	0.00
ATOM	3658	HH22	ARG	150	-1.919	14.441	2.229	1.00	0.00
ATOM	3659	N	LEU	151	1.606	13.412	6.862	1.00	33.58
ATOM	3660	CA	LEU	151	1.415	14.738	7.434	1.00	30.33
ATOM	3661	C	LEU	151	0.016	15.146	6.998	1.00	29.75
ATOM	3662	O	LEU	151	-0.240	15.359	5.810	1.00	32.33
ATOM	3663	CB	LEU	151	2.438	15.718	6.857	1.00	29.57
ATOM	3664	CG	LEU	151	2.288	17.196	7.227	1.00	28.37
ATOM	3665	CD1	LEU	151	2.698	17.417	8.671	1.00	27.54
ATOM	3666	CD2	LEU	151	3.136	18.049	6.295	1.00	27.57
ATOM	3667	H	LEU	151	2.183	13.304	6.079	1.00	0.00
ATOM	3668	N	PRO	152	-0.920	15.231	7.942	1.00	27.48
ATOM	3669	CA	PRO	152	-2.289	15.612	7.600	1.00	25.97
ATOM	3670	C	PRO	152	-2.425	17.049	7.100	1.00	24.76
ATOM	3671	O	PRO	152	-1.610	17.920	7.428	1.00	25.13
ATOM	3672	CB	PRO	152	-3.017	15.430	8.925	1.00	26.39
ATOM	3673	CG	PRO	152	-1.977	15.825	9.910	1.00	27.66
ATOM	3674	CD	PRO	152	-0.765	15.087	9.397	1.00	27.22
ATOM	3675	N	PRO	152A	-3.424	17.304	6.240	1.00	22.89
ATOM	3676	CA	PRO	152A	-3.642	18.656	5.717	1.00	21.45
ATOM	3677	C	PRO	152A	-4.019	19.579	6.878	1.00	20.40
ATOM	3678	O	PRO	152A	-4.628	19.136	7.848	1.00	21.48
ATOM	3679	CB	PRO	152A	-4.802	18.457	4.740	1.00	20.23
ATOM	3680	CG	PRO	152A	-5.485	17.221	5.235	1.00	20.11
ATOM	3681	CD	PRO	152A	-4.342	16.343	5.610	1.00	21.47
ATOM	3682	N	PRO	152B	-3.627	20.861	6.822	1.00	19.54
ATOM	3683	CA	PRO	152B	-3.130	21.633	5.682	1.00	20.04
ATOM	3684	C	PRO	152B	-1.614	21.535	5.424	1.00	20.39
ATOM	3685	O	PRO	152B	-0.980	22.533	5.054	1.00	20.71
ATOM	3686	CB	PRO	152B	-3.534	23.053	6.059	1.00	19.55
ATOM	3687	CG	PRO	152B	-3.275	23.066	7.514	1.00	17.27
ATOM	3688	CD	PRO	152B	-3.874	21.753	7.969	1.00	18.19
ATOM	3689	N	PHE	153	-1.031	20.366	5.682	1.00	18.32
ATOM	3690	CA	PHE	153	0.389	20.120	5.440	1.00	16.85
ATOM	3691	C	PHE	153	1.321	21.248	5.902	1.00	17.00
ATOM	3692	O	PHE	153	2.023	21.860	5.090	1.00	16.84
ATOM	3693	CB	PHE	153	0.627	19.895	3.948	1.00	14.47
ATOM	3694	CG	PHE	153	-0.486	19.194	3.245	1.00	12.59
ATOM	3695	CD1	PHE	153	-1.423	19.921	2.521	1.00	11.93
ATOM	3696	CD2	PHE	153	-0.575	17.811	3.262	1.00	12.66
ATOM	3697	CE1	PHE	153	-2.429	19.281	1.819	1.00	11.58

81/126

ATOM	3698	CE2	PHE	153	-1.582	17.157	2.560	1.00	12.96
ATOM	3699	CZ	PHE	153	-2.511	17.893	1.836	1.00	12.43
ATOM	3700	H	PHE	153	-1.498	19.621	6.101	1.00	0.00
ATOM	3701	N	PRO	154	1.349	21.535	7.205	1.00	16.98
ATOM	3702	CA	PRO	154	2.224	22.607	7.685	1.00	18.46
ATOM	3703	C	PRO	154	3.683	22.166	7.675	1.00	20.76
ATOM	3704	O	PRO	154	3.964	20.976	7.796	1.00	23.06
ATOM	3705	CB	PRO	154	1.728	22.814	9.106	1.00	18.11
ATOM	3706	CG	PRO	154	1.398	21.404	9.538	1.00	17.22
ATOM	3707	CD	PRO	154	0.690	20.838	8.325	1.00	17.21
ATOM	3708	N	LEU	155	4.607	23.107	7.498	1.00	20.75
ATOM	3709	CA	LEU	155	6.033	22.778	7.515	1.00	20.02
ATOM	3710	C	LEU	155	6.431	22.537	8.969	1.00	20.39
ATOM	3711	O	LEU	155	6.289	23.429	9.804	1.00	22.00
ATOM	3712	CB	LEU	155	6.866	23.928	6.937	1.00	19.71
ATOM	3713	CG	LEU	155	8.395	23.890	7.113	1.00	18.62
ATOM	3714	CD1	LEU	155	8.985	22.667	6.439	1.00	18.68
ATOM	3715	CD2	LEU	155	9.010	25.157	6.533	1.00	17.30
ATOM	3716	H	LEU	155	4.308	24.025	7.345	1.00	0.00
ATOM	3717	N	LYS	156	6.916	21.337	9.270	1.00	18.99
ATOM	3718	CA	LYS	156	7.325	21.000	10.629	1.00	17.90
ATOM	3719	C	LYS	156	8.836	21.054	10.807	1.00	17.45
ATOM	3720	O	LYS	156	9.592	21.000	9.835	1.00	16.87
ATOM	3721	CB	LYS	156	6.798	19.621	11.038	1.00	17.74
ATOM	3722	CG	LYS	156	5.309	19.576	11.352	1.00	16.80
ATOM	3723	CD	LYS	156	4.890	18.182	11.785	1.00	18.08
ATOM	3724	CE	LYS	156	5.505	17.784	13.128	1.00	20.35
ATOM	3725	NZ	LYS	156	5.344	16.329	13.460	1.00	20.97
ATOM	3726	H	LYS	156	7.078	20.679	8.560	1.00	0.00
ATOM	3727	HZ1	LYS	156	5.941	15.757	12.818	1.00	0.00
ATOM	3728	HZ2	LYS	156	4.359	16.030	13.364	1.00	0.00
ATOM	3729	HZ3	LYS	156	5.642	16.084	14.426	1.00	0.00
ATOM	3730	N	GLN	157	9.258	21.123	12.067	1.00	18.39
ATOM	3731	CA	GLN	157	10.664	21.210	12.450	1.00	19.27
ATOM	3732	C	GLN	157	10.870	20.453	13.758	1.00	20.05
ATOM	3733	O	GLN	157	9.923	20.256	14.517	1.00	20.91
ATOM	3734	CB	GLN	157	11.018	22.675	12.712	1.00	19.96
ATOM	3735	CG	GLN	157	10.229	23.272	13.895	1.00	19.36
ATOM	3736	CD	GLN	157	10.516	24.742	14.160	1.00	20.05
ATOM	3737	OE1	GLN	157	10.802	25.522	13.242	1.00	20.12
ATOM	3738	NE2	GLN	157	10.418	25.132	15.420	1.00	19.86
ATOM	3739	H	GLN	157	8.590	21.162	12.782	1.00	0.00
ATOM	3740	HE21	GLN	157	10.162	24.470	16.090	1.00	0.00
ATOM	3741	HE22	GLN	157	10.606	26.072	15.608	1.00	0.00
ATOM	3742	N	VAL	158	12.110	20.076	14.044	1.00	19.79
ATOM	3743	CA	VAL	158	12.424	19.388	15.286	1.00	19.85
ATOM	3744	C	VAL	158	13.897	19.544	15.617	1.00	22.43
ATOM	3745	O	VAL	158	14.737	19.550	14.716	1.00	24.62
ATOM	3746	CB	VAL	158	12.078	17.898	15.224	1.00	18.99
ATOM	3747	CG1	VAL	158	12.969	17.169	14.239	1.00	19.16
ATOM	3748	CG2	VAL	158	12.218	17.303	16.587	1.00	20.14
ATOM	3749	H	VAL	158	12.819	20.239	13.382	1.00	0.00
ATOM	3750	N	LYS	159	14.206	19.729	16.896	1.00	24.32
ATOM	3751	CA	LYS	159	15.596	19.870	17.318	1.00	26.22
ATOM	3752	C	LYS	159	16.181	18.476	17.484	1.00	26.66
ATOM	3753	O	LYS	159	15.661	17.669	18.256	1.00	27.72
ATOM	3754	CB	LYS	159	15.702	20.640	18.640	1.00	28.05
ATOM	3755	CG	LYS	159	17.143	20.892	19.093	1.00	30.96
ATOM	3756	CD	LYS	159	17.236	21.509	20.494	1.00	33.80
ATOM	3757	CE	LYS	159	16.838	22.992	20.539	1.00	35.50
ATOM	3758	NZ	LYS	159	17.792	23.911	19.836	1.00	36.76
ATOM	3759	H	LYS	159	13.474	19.763	17.547	1.00	0.00
ATOM	3760	HZ1	LYS	159	17.817	23.689	18.819	1.00	0.00

82/176

ATOM	3761	H22	LYS	159	18.746	23.834	20.239	1.00	0.00
ATOM	3762	H23	LYS	159	17.456	24.891	19.940	1.00	0.00
ATOM	3763	N	VAL	160	17.252	18.192	16.756	1.00	25.77
ATOM	3764	CA	VAL	160	17.894	16.890	16.820	1.00	25.19
ATOM	3765	C	VAL	160	19.331	17.005	17.307	1.00	24.85
ATOM	3766	O	VAL	160	20.053	17.922	16.917	1.00	24.58
ATOM	3767	CB	VAL	160	17.892	16.190	15.441	1.00	25.80
ATOM	3768	CG1	VAL	160	16.480	15.826	15.039	1.00	26.37
ATOM	3769	CG2	VAL	160	18.531	17.086	14.391	1.00	24.77
ATOM	3770	H	VAL	160	17.623	18.884	16.195	1.00	0.00
ATOM	3771	N	PRO	161	19.736	16.116	18.230	1.00	24.60
ATOM	3772	CA	PRO	161	21.093	16.101	18.783	1.00	23.63
ATOM	3773	C	PRO	161	22.051	15.391	17.833	1.00	23.67
ATOM	3774	O	PRO	161	21.764	14.277	17.407	1.00	23.91
ATOM	3775	CB	PRO	161	20.911	15.303	20.071	1.00	23.61
ATOM	3776	CG	PRO	161	19.834	14.326	19.709	1.00	21.45
ATOM	3777	CD	PRO	161	18.854	15.205	18.989	1.00	23.62
ATOM	3778	N	ILE	162	23.145	16.052	17.460	1.00	24.01
ATOM	3779	CA	ILE	162	24.147	15.457	16.564	1.00	24.35
ATOM	3780	C	ILE	162	24.814	14.283	17.270	1.00	26.36
ATOM	3781	O	ILE	162	25.017	14.314	18.485	1.00	28.28
ATOM	3782	CB	ILE	162	25.265	16.471	16.180	1.00	22.68
ATOM	3783	CG1	ILE	162	24.772	17.459	15.128	1.00	22.47
ATOM	3784	CG2	ILE	162	26.488	15.748	15.635	1.00	22.99
ATOM	3785	H	ILE	162	23.295	16.977	17.753	1.00	0.00
ATOM	3786	CD	ILE	162	24.562	16.840	13.773	1.00	23.92
ATOM	3787	N	MET	163	25.171	13.259	16.508	1.00	26.92
ATOM	3788	CA	MET	163	25.835	12.096	17.071	1.00	27.14
ATOM	3789	C	MET	163	27.113	11.847	16.294	1.00	26.70
ATOM	3790	O	MET	163	27.169	12.043	15.080	1.00	26.56
ATOM	3791	CB	MET	163	24.935	10.863	17.018	1.00	28.49
ATOM	3792	CG	MET	163	25.540	9.660	17.706	1.00	32.12
ATOM	3793	SD	MET	163	24.403	8.288	17.898	1.00	35.49
ATOM	3794	CE	MET	163	23.078	9.094	18.802	1.00	36.50
ATOM	3795	H	MET	163	25.009	13.295	15.549	1.00	0.00
ATOM	3796	N	GLU	164	28.147	11.441	17.016	1.00	26.10
ATOM	3797	CA	GLU	164	29.447	11.168	16.437	1.00	25.57
ATOM	3798	C	GLU	164	29.351	9.860	15.650	1.00	24.91
ATOM	3799	O	GLU	164	28.704	8.910	16.101	1.00	24.54
ATOM	3800	CB	GLU	164	30.464	11.078	17.574	1.00	26.32
ATOM	3801	CG	GLU	164	31.889	11.396	17.193	1.00	27.94
ATOM	3802	CD	GLU	164	32.647	10.184	16.731	1.00	29.60
ATOM	3803	OE1	GLU	164	32.110	9.066	16.859	1.00	30.62
ATOM	3804	OE2	GLU	164	33.787	10.340	16.245	1.00	31.23
ATOM	3805	H	GLU	164	28.029	11.296	17.974	1.00	0.00
ATOM	3806	N	ASN	165	29.965	9.826	14.467	1.00	24.44
ATOM	3807	CA	ASN	165	29.936	8.643	13.598	1.00	23.80
ATOM	3808	C	ASN	165	30.196	7.323	14.314	1.00	25.34
ATOM	3809	O	ASN	165	29.352	6.441	14.297	1.00	24.57
ATOM	3810	CB	ASN	165	30.925	8.779	12.427	1.00	21.73
ATOM	3811	CG	ASN	165	30.386	9.630	11.280	1.00	19.60
ATOM	3812	OD1	ASN	165	29.701	10.625	11.497	1.00	18.77
ATOM	3813	ND2	ASN	165	30.725	9.255	10.056	1.00	17.38
ATOM	3814	H	ASN	165	30.458	10.612	14.157	1.00	0.00
ATOM	3815	HD21	ASN	165	31.292	8.468	9.911	1.00	0.00
ATOM	3816	HD22	ASN	165	30.350	9.786	9.318	1.00	0.00
ATOM	3817	N	HIS	166	31.339	7.210	14.985	1.00	29.08
ATOM	3818	CA	HIS	166	31.720	5.981	15.690	1.00	31.78
ATOM	3819	C	HIS	166	30.678	5.492	16.683	1.00	30.56
ATOM	3820	O	HIS	166	30.415	4.291	16.779	1.00	29.97
ATOM	3821	CB	HIS	166	33.062	6.161	16.396	1.00	37.52
ATOM	3822	CG	HIS	166	34.184	6.513	15.470	1.00	44.81
ATOM	3823	ND1	HIS	166	34.720	7.781	15.397	1.00	48.34

83/126

ATOM	3824	CD2	HIS	166	34.864	5.767	14.566	1.00	47.83
ATOM	3825	CE1	HIS	166	35.678	7.805	14.487	1.00	50.35
ATOM	3826	NE2	HIS	166	35.786	6.593	13.968	1.00	50.40
ATOM	3827	H	HIS	166	31.909	8.003	15.080	1.00	0.00
ATOM	3828	HD1	HIS	166	34.436	8.547	15.962	1.00	0.00
ATOM	3829	HE2	HIS	166	36.430	6.307	13.297	1.00	0.00
ATOM	3830	N	ILE	167	30.099	6.420	17.433	1.00	29.81
ATOM	3831	CA	ILE	167	29.069	6.066	18.406	1.00	28.28
ATOM	3832	C	ILE	167	27.817	5.604	17.659	1.00	28.58
ATOM	3833	O	ILE	167	27.121	4.671	18.084	1.00	29.23
ATOM	3834	CB	ILE	167	28.745	7.267	19.319	1.00	25.29
ATOM	3835	CG1	ILE	167	29.918	7.516	20.263	1.00	22.49
ATOM	3836	CG2	ILE	167	27.474	7.024	20.102	1.00	25.92
ATOM	3837	H	ILE	167	30.420	7.343	17.333	1.00	0.00
ATOM	3838	CD	ILE	167	30.225	6.346	21.150	1.00	19.13
ATOM	3839	N	CYS	168	27.572	6.238	16.517	1.00	27.21
ATOM	3840	CA	CYS	168	26.420	5.936	15.681	1.00	24.91
ATOM	3841	C	CYS	168	26.536	4.595	14.978	1.00	23.89
ATOM	3842	O	CYS	168	25.588	3.816	14.953	1.00	24.59
ATOM	3843	CB	CYS	168	26.237	7.037	14.652	1.00	23.00
ATOM	3844	SG	CYS	168	24.641	6.989	13.801	1.00	19.58
ATOM	3845	H	CYS	168	28.172	6.967	16.256	1.00	0.00
ATOM	3846	N	ASP	169	27.695	4.332	14.395	1.00	22.73
ATOM	3847	CA	ASP	169	27.928	3.078	13.705	1.00	22.97
ATOM	3848	C	ASP	169	27.700	1.939	14.700	1.00	23.84
ATOM	3849	O	ASP	169	27.077	0.923	14.373	1.00	24.60
ATOM	3850	CB	ASP	169	29.353	3.045	13.156	1.00	23.86
ATOM	3851	CG	ASP	169	29.576	1.912	12.182	1.00	26.51
ATOM	3852	OD1	ASP	169	28.592	1.453	11.569	1.00	27.87
ATOM	3853	OD2	ASP	169	30.736	1.476	12.016	1.00	28.55
ATOM	3854	H	ASP	169	28.392	4.986	14.412	1.00	0.00
ATOM	3855	N	ALA	170	28.142	2.159	15.937	1.00	23.68
ATOM	3856	CA	ALA	170	27.997	1.193	17.024	1.00	22.37
ATOM	3857	C	ALA	170	26.545	0.776	17.184	1.00	20.80
ATOM	3858	O	ALA	170	26.236	-0.395	17.386	1.00	21.39
ATOM	3859	CB	ALA	170	28.499	1.796	18.322	1.00	23.79
ATOM	3860	H	ALA	170	28.622	2.995	16.114	1.00	0.00
ATOM	3861	N	LYS	171	25.654	1.745	17.063	1.00	19.15
ATOM	3862	CA	LYS	171	24.233	1.492	17.191	1.00	20.10
ATOM	3863	C	LYS	171	23.716	0.607	16.055	1.00	19.94
ATOM	3864	O	LYS	171	22.983	-0.355	16.294	1.00	20.69
ATOM	3865	CB	LYS	171	23.480	2.822	17.203	1.00	21.21
ATOM	3866	CG	LYS	171	24.150	3.881	18.062	1.00	21.17
ATOM	3867	CD	LYS	171	23.824	3.698	19.517	1.00	21.72
ATOM	3868	CE	LYS	171	22.585	4.481	19.862	1.00	22.89
ATOM	3869	NZ	LYS	171	22.867	5.945	19.819	1.00	23.93
ATOM	3870	H	LYS	171	25.990	2.650	16.890	1.00	0.00
ATOM	3871	HZ1	LYS	171	23.249	6.252	18.902	1.00	0.00
ATOM	3872	HZ2	LYS	171	23.579	6.142	20.560	1.00	0.00
ATOM	3873	HZ3	LYS	171	22.024	6.494	20.069	1.00	0.00
ATOM	3874	N	TYR	172	24.122	0.908	14.825	1.00	19.08
ATOM	3875	CA	TYR	172	23.658	0.135	13.678	1.00	19.28
ATOM	3876	C	TYR	172	24.064	-1.322	13.712	1.00	21.15
ATOM	3877	O	TYR	172	23.418	-2.172	13.092	1.00	22.03
ATOM	3878	CB	TYR	172	24.045	0.797	12.358	1.00	17.33
ATOM	3879	CG	TYR	172	23.017	1.813	11.915	1.00	16.92
ATOM	3880	CD1	TYR	172	22.956	3.073	12.506	1.00	17.60
ATOM	3881	CD2	TYR	172	22.078	1.505	10.935	1.00	16.62
ATOM	3882	CE1	TYR	172	21.986	3.999	12.136	1.00	16.87
ATOM	3883	CE2	TYR	172	21.109	2.423	10.560	1.00	17.13
ATOM	3884	CZ	TYR	172	21.070	3.669	11.166	1.00	17.08
ATOM	3885	OH	TYR	172	20.119	4.589	10.795	1.00	18.81
ATOM	3886	H	TYR	172	24.723	1.676	14.705	1.00	0.00

84/126

ATOM	3887	HH	TYR	172	19.627	4.211	10.073	1.00	0.00
ATOM	3888	N	HIS	173	25.137	-1.617	14.432	1.00	21.59
ATOM	3889	CA	HIS	173	25.570	-2.996	14.573	1.00	22.42
ATOM	3890	C	HIS	173	24.785	-3.636	15.708	1.00	24.81
ATOM	3891	O	HIS	173	24.507	-4.838	15.684	1.00	25.91
ATOM	3892	CB	HIS	173	27.062	-3.061	14.859	1.00	20.46
ATOM	3893	CG	HIS	173	27.899	-2.671	13.691	1.00	18.20
ATOM	3894	ND1	HIS	173	28.356	-3.585	12.769	1.00	17.81
ATOM	3895	CD2	HIS	173	28.323	-1.458	13.267	1.00	18.07
ATOM	3896	CE1	HIS	173	29.022	-2.949	11.822	1.00	18.52
ATOM	3897	NE2	HIS	173	29.019	-1.659	12.102	1.00	18.15
ATOM	3898	H	HIS	173	25.644	-0.875	14.824	1.00	0.00
ATOM	3899	HD1	HIS	173	28.234	-4.564	12.830	1.00	0.00
ATOM	3900	HE2	HIS	173	29.511	-0.946	11.624	1.00	0.00
ATOM	3901	N	LEU	173A	24.384	-2.813	16.674	1.00	26.04
ATOM	3902	CA	LEU	173A	23.630	-3.273	17.832	1.00	27.52
ATOM	3903	C	LEU	173A	22.260	-3.809	17.431	1.00	27.26
ATOM	3904	O	LEU	173A	21.342	-3.044	17.133	1.00	28.04
ATOM	3905	CB	LEU	173A	23.485	-2.137	18.845	1.00	31.03
ATOM	3906	CG	LEU	173A	23.502	-2.536	20.326	1.00	34.64
ATOM	3907	CD1	LEU	173A	23.961	-1.346	21.165	1.00	35.28
ATOM	3908	CD2	LEU	173A	22.132	-3.068	20.791	1.00	36.09
ATOM	3909	H	LEU	173A	24.608	-1.858	16.631	1.00	0.00
ATOM	3910	N	GLY	173B	22.139	-5.132	17.416	1.00	26.76
ATOM	3911	CA	GLY	173B	20.891	-5.769	17.046	1.00	26.34
ATOM	3912	C	GLY	173B	20.935	-6.315	15.632	1.00	26.87
ATOM	3913	O	GLY	173B	19.925	-6.783	15.107	1.00	27.77
ATOM	3914	H	GLY	173B	22.933	-5.677	17.604	1.00	0.00
ATOM	3915	N	ALA	173C	22.116	-6.301	15.028	1.00	26.46
ATOM	3916	CA	ALA	173C	22.281	-6.777	13.666	1.00	27.18
ATOM	3917	C	ALA	173C	23.362	-7.849	13.583	1.00	28.08
ATOM	3918	O	ALA	173C	24.112	-8.057	14.534	1.00	30.04
ATOM	3919	CB	ALA	173C	22.623	-5.605	12.760	1.00	27.71
ATOM	3920	H	ALA	173C	22.935	-5.987	15.464	1.00	0.00
ATOM	3921	N	TYR	173D	23.430	-8.536	12.447	1.00	27.96
ATOM	3922	CA	TYR	173D	24.422	-9.588	12.237	1.00	27.77
ATOM	3923	C	TYR	173D	25.723	-9.049	11.653	1.00	26.96
ATOM	3924	O	TYR	173D	26.773	-9.680	11.772	1.00	27.21
ATOM	3925	CB	TYR	173D	23.893	-10.641	11.271	1.00	28.74
ATOM	3926	CG	TYR	173D	22.621	-11.335	11.681	1.00	29.41
ATOM	3927	CD1	TYR	173D	22.547	-12.080	12.858	1.00	28.70
ATOM	3928	CD2	TYR	173D	21.513	-11.320	10.839	1.00	30.22
ATOM	3929	CE1	TYR	173D	21.401	-12.800	13.177	1.00	29.46
ATOM	3930	CE2	TYR	173D	20.372	-12.033	11.146	1.00	30.97
ATOM	3931	CZ	TYR	173D	20.318	-12.774	12.308	1.00	30.75
ATOM	3932	OH	TYR	173D	19.179	-13.504	12.564	1.00	31.93
ATOM	3933	H	TYR	173D	22.783	-8.335	11.755	1.00	0.00
ATOM	3934	HH	TYR	173D	18.654	-13.419	11.758	1.00	0.00
ATOM	3935	N	THR	173E	25.636	-7.921	10.962	1.00	25.61
ATOM	3936	CA	THR	173E	26.799	-7.319	10.341	1.00	25.40
ATOM	3937	C	THR	173E	27.946	-7.207	11.348	1.00	27.58
ATOM	3938	O	THR	173E	27.763	-6.725	12.478	1.00	27.28
ATOM	3939	CB	THR	173E	26.460	-5.925	9.785	1.00	24.02
ATOM	3940	OG1	THR	173E	25.111	-5.917	9.302	1.00	22.74
ATOM	3941	CG2	THR	173E	27.385	-5.580	8.636	1.00	23.23
ATOM	3942	H	THR	173E	24.793	-7.438	10.874	1.00	0.00
ATOM	3943	HG1	THR	173E	25.140	-6.441	8.492	1.00	0.00
ATOM	3944	N	GLY	173F	29.124	-7.658	10.923	1.00	29.32
ATOM	3945	CA	GLY	173F	30.301	-7.625	11.769	1.00	32.00
ATOM	3946	C	GLY	173F	30.678	-6.217	12.172	1.00	34.76
ATOM	3947	O	GLY	173F	30.589	-5.293	11.362	1.00	34.01
ATOM	3948	H	GLY	173F	29.171	-7.992	10.009	1.00	0.00
ATOM	3949	N	ASP	173G	31.113	-6.054	13.419	1.00	38.04

85/126

ATOM	3950	CA	ASP	173G	31.497	-4.747	13.943	1.00	40.65
ATOM	3951	C	ASP	173G	32.578	-4.036	13.145	1.00	42.04
ATOM	3952	O	ASP	173G	32.655	-2.808	13.156	1.00	43.25
ATOM	3953	CB	ASP	173G	31.880	-4.838	15.421	1.00	41.44
ATOM	3954	CG	ASP	173G	30.688	-4.629	16.340	1.00	43.66
ATOM	3955	OD1	ASP	173G	30.336	-3.458	16.608	1.00	45.53
ATOM	3956	OD2	ASP	173G	30.087	-5.632	16.771	1.00	43.77
ATOM	3957	H	ASP	173G	31.140	-6.813	14.038	1.00	0.00
ATOM	3958	N	ASP	173H	33.383	-4.802	12.419	1.00	43.27
ATOM	3959	CA	ASP	173H	34.439	-4.221	11.600	1.00	45.93
ATOM	3960	C	ASP	173H	33.929	-3.784	10.229	1.00	44.70
ATOM	3961	O	ASP	173H	34.706	-3.351	9.368	1.00	45.44
ATOM	3962	CB	ASP	173H	35.622	-5.185	11.466	1.00	51.39
ATOM	3963	CG	ASP	173H	36.475	-5.242	12.732	1.00	56.30
ATOM	3964	OD1	ASP	173H	36.854	-6.363	13.144	1.00	58.77
ATOM	3965	OD2	ASP	173H	36.754	-4.169	13.322	1.00	57.79
ATOM	3966	H	ASP	173H	33.315	-5.771	12.465	1.00	0.00
ATOM	3967	N	VAL	173I	32.623	-3.922	10.024	1.00	41.33
ATOM	3968	CA	VAL	173I	31.991	-3.515	8.781	1.00	38.26
ATOM	3969	C	VAL	173I	31.484	-2.117	9.052	1.00	36.58
ATOM	3970	O	VAL	173I	30.802	-1.894	10.049	1.00	36.82
ATOM	3971	CB	VAL	173I	30.784	-4.399	8.438	1.00	38.72
ATOM	3972	CG1	VAL	173I	30.134	-3.921	7.136	1.00	37.56
ATOM	3973	CG2	VAL	173I	31.211	-5.859	8.342	1.00	39.09
ATOM	3974	H	VAL	173I	32.052	-4.278	10.721	1.00	0.00
ATOM	3975	N	ARG	174	31.826	-1.171	8.187	1.00	34.82
ATOM	3976	CA	ARG	174	31.382	0.196	8.386	1.00	33.41
ATOM	3977	C	ARG	174	30.022	0.457	7.749	1.00	31.34
ATOM	3978	O	ARG	174	29.910	0.658	6.540	1.00	33.32
ATOM	3979	CB	ARG	174	32.433	1.181	7.875	1.00	36.21
ATOM	3980	CG	ARG	174	32.200	2.601	8.365	1.00	40.74
ATOM	3981	CD	ARG	174	33.398	3.486	8.113	1.00	42.22
ATOM	3982	NE	ARG	174	34.578	2.993	8.808	1.00	43.78
ATOM	3983	CZ	ARG	174	35.822	3.218	8.405	1.00	45.52
ATOM	3984	NH1	ARG	174	36.049	3.940	7.312	1.00	46.09
ATOM	3985	NH2	ARG	174	36.839	2.731	9.100	1.00	46.37
ATOM	3986	H	ARG	174	32.389	-1.405	7.421	1.00	0.00
ATOM	3987	HE	ARG	174	34.403	2.489	9.637	1.00	0.00
ATOM	3988	HH11	ARG	174	35.333	4.398	6.771	1.00	0.00
ATOM	3989	HH12	ARG	174	36.991	4.002	6.960	1.00	0.00
ATOM	3990	HH21	ARG	174	36.726	2.149	9.911	1.00	0.00
ATOM	3991	HH22	ARG	174	37.786	2.809	8.747	1.00	0.00
ATOM	3992	N	ILE	175	28.986	0.444	8.576	1.00	28.47
ATOM	3993	CA	ILE	175	27.628	0.675	8.115	1.00	26.99
ATOM	3994	C	ILE	175	27.432	2.136	7.767	1.00	26.69
ATOM	3995	O	ILE	175	27.010	2.460	6.654	1.00	26.41
ATOM	3996	CB	ILE	175	26.615	0.244	9.176	1.00	27.22
ATOM	3997	CG1	ILE	175	26.630	-1.283	9.308	1.00	27.52
ATOM	3998	CG2	ILE	175	25.235	0.756	8.823	1.00	27.90
ATOM	3999	H	ILE	175	29.152	0.326	9.538	1.00	0.00
ATOM	4000	CD	ILE	175	25.818	-1.815	10.465	1.00	28.13
ATOM	4001	N	VAL	176	27.705	3.017	8.725	1.00	27.11
ATOM	4002	CA	VAL	176	27.581	4.449	8.478	1.00	27.74
ATOM	4003	C	VAL	176	28.954	4.980	8.067	1.00	28.52
ATOM	4004	O	VAL	176	29.867	5.113	8.884	1.00	28.13
ATOM	4005	CB	VAL	176	26.986	5.214	9.688	1.00	26.10
ATOM	4006	CG1	VAL	176	27.761	4.942	10.923	1.00	26.68
ATOM	4007	CG2	VAL	176	26.959	6.700	9.407	1.00	26.65
ATOM	4008	H	VAL	176	28.037	2.699	9.601	1.00	0.00
ATOM	4009	N	ARG	177	29.100	5.205	6.764	1.00	29.65
ATOM	4010	CA	ARG	177	30.343	5.679	6.158	1.00	30.11
ATOM	4011	C	ARG	177	30.839	7.043	6.652	1.00	28.52
ATOM	4012	O	ARG	177	30.132	7.776	7.348	1.00	26.59

06/176

ATOM	4013	CB	ARG	177	30.197	5.718	4.628	1.00	32.96
ATOM	4014	CG	ARG	177	29.559	4.476	3.981	1.00	36.76
ATOM	4015	CD	ARG	177	30.370	3.205	4.196	1.00	39.35
ATOM	4016	NE	ARG	177	30.339	2.340	3.015	1.00	41.18
ATOM	4017	CZ	ARG	177	29.588	1.247	2.890	1.00	42.10
ATOM	4018	NH1	ARG	177	28.783	0.864	3.880	1.00	42.61
ATOM	4019	NH2	ARG	177	29.664	0.519	1.781	1.00	41.14
ATOM	4020	H	ARG	177	28.323	5.057	6.189	1.00	0.00
ATOM	4021	HE	ARG	177	30.910	2.641	2.278	1.00	0.00
ATOM	4022	HH11	ARG	177	28.752	1.384	4.738	1.00	0.00
ATOM	4023	HH12	ARG	177	28.150	0.090	3.844	1.00	0.00
ATOM	4024	HH21	ARG	177	30.254	0.754	1.003	1.00	0.00
ATOM	4025	HH22	ARG	177	29.105	-0.298	1.666	1.00	0.00
ATOM	4026	N	ASP	178	32.045	7.401	6.224	1.00	29.05
ATOM	4027	CA	ASP	178	32.662	8.664	6.612	1.00	29.02
ATOM	4028	C	ASP	178	32.037	9.905	5.962	1.00	28.32
ATOM	4029	O	ASP	178	32.301	11.031	6.386	1.00	30.20
ATOM	4030	CB	ASP	178	34.177	8.609	6.375	1.00	29.37
ATOM	4031	CG	ASP	178	34.867	7.587	7.271	1.00	31.13
ATOM	4032	OD1	ASP	178	35.090	7.879	8.464	1.00	32.35
ATOM	4033	OD2	ASP	178	35.183	6.474	6.799	1.00	31.08
ATOM	4034	H	ASP	178	32.572	6.821	5.633	1.00	0.00
ATOM	4035	N	ASP	179	31.199	.707	4.950	1.00	26.25
ATOM	4036	CA	ASP	179	30.536	10.931	4.297	1.00	23.43
ATOM	4037	C	ASP	179	29.093	10.934	4.781	1.00	22.91
ATOM	4038	O	ASP	179	28.242	11.553	4.143	1.00	24.05
ATOM	4039	CB	ASP	179	30.612	10.734	2.763	1.00	21.79
ATOM	4040	CG	ASP	179	29.903	9.520	2.201	1.00	19.83
ATOM	4041	OD1	ASP	179	29.987	8.427	2.799	1.00	20.18
ATOM	4042	OD2	ASP	179	29.277	9.654	1.132	1.00	18.73
ATOM	4043	H	ASP	179	31.015	8.814	4.590	1.00	0.00
ATOM	4044	N	MET	180	28.831	10.339	5.937	1.00	21.35
ATOM	4045	CA	MET	180	27.508	10.380	6.536	1.00	19.41
ATOM	4046	C	MET	180	27.647	11.076	7.879	1.00	19.51
ATOM	4047	O	MET	180	28.761	11.262	8.380	1.00	19.99
ATOM	4048	CB	MET	180	26.948	8.966	6.707	1.00	18.25
ATOM	4049	CG	MET	180	26.689	8.260	5.384	1.00	16.80
ATOM	4050	SD	MET	180	26.513	6.481	5.534	1.00	16.44
ATOM	4051	CE	MET	180	26.539	6.033	3.830	1.00	15.90
ATOM	4052	H	MET	180	29.530	9.850	6.408	1.00	0.00
ATOM	4053	N	LEU	181	26.518	11.494	8.433	1.00	18.94
ATOM	4054	CA	LEU	181	26.471	12.185	9.710	1.00	18.97
ATOM	4055	C	LEU	181	25.213	11.684	10.410	1.00	21.06
ATOM	4056	O	LEU	181	24.217	11.389	9.747	1.00	24.08
ATOM	4057	CB	LEU	181	26.403	13.698	9.468	1.00	16.56
ATOM	4058	CG	LEU	181	26.092	14.664	10.618	1.00	17.36
ATOM	4059	CD1	LEU	181	26.623	16.030	10.261	1.00	15.96
ATOM	4060	CD2	LEU	181	24.592	14.730	10.921	1.00	14.35
ATOM	4061	H	LEU	181	25.674	11.336	7.960	1.00	0.00
ATOM	4062	N	CYS	182	25.257	11.572	11.733	1.00	20.56
ATOM	4063	CA	CYS	182	24.109	11.100	12.497	1.00	20.63
ATOM	4064	C	CYS	182	23.497	12.158	13.389	1.00	23.21
ATOM	4065	O	CYS	182	24.202	13.019	13.927	1.00	24.72
ATOM	4066	CB	CYS	182	24.503	9.923	13.363	1.00	18.83
ATOM	4067	SG	CYS	182	24.877	8.436	12.415	1.00	18.84
ATOM	4068	H	CYS	182	26.065	11.822	12.229	1.00	0.00
ATOM	4069	N	ALA	183	22.187	12.059	13.579	1.00	23.87
ATOM	4070	CA	ALA	183	21.458	12.992	14.417	1.00	25.45
ATOM	4071	C	ALA	183	20.085	12.423	14.722	1.00	27.64
ATOM	4072	O	ALA	183	19.590	11.570	13.988	1.00	28.99
ATOM	4073	CB	ALA	183	21.327	14.330	13.708	1.00	25.67
ATOM	4074	H	ALA	183	21.682	11.364	13.096	1.00	0.00
ATOM	4075	N	GLY	184	19.500	12.853	15.836	1.00	29.08

87/126

ATOM	4076	CA	GLY	184	18.174	12.392	16.204	1.00	30.66
ATOM	4077	C	GLY	184	18.148	11.430	17.369	1.00	32.35
ATOM	4078	O	GLY	184	19.138	11.293	18.091	1.00	32.85
ATOM	4079	H	GLY	184	20.035	13.409	16.440	1.00	0.00
ATOM	4080	N	ASN	185	16.990	10.806	17.576	1.00	34.24
ATOM	4081	CA	ASN	185	16.773	9.830	18.645	1.00	36.16
ATOM	4082	C	ASN	185	15.407	9.161	18.440	1.00	36.57
ATOM	4083	O	ASN	185	14.945	9.056	17.308	1.00	37.28
ATOM	4084	CB	ASN	185	16.874	10.496	20.029	1.00	37.81
ATOM	4085	CG	ASN	185	15.803	11.557	20.269	1.00	40.23
ATOM	4086	OD1	ASN	185	14.766	11.582	19.608	1.00	42.19
ATOM	4087	ND2	ASN	185	16.040	12.420	21.248	1.00	41.19
ATOM	4088	H	ASN	185	16.224	11.035	16.997	1.00	0.00
ATOM	4089	HD21	ASN	185	16.882	12.315	21.737	1.00	0.00
ATOM	4090	HD22	ASN	185	15.374	13.105	21.443	1.00	0.00
ATOM	4091	N	THR	186	14.760	8.716	19.516	1.00	36.33
ATOM	4092	CA	THR	186	13.454	8.063	19.410	1.00	36.28
ATOM	4093	C	THR	186	12.253	9.006	19.414	1.00	36.80
ATOM	4094	O	THR	186	11.146	8.602	19.070	1.00	37.63
ATOM	4095	CB	THR	186	13.236	7.042	20.547	1.00	36.18
ATOM	4096	OG1	THR	186	14.469	6.817	21.244	1.00	36.17
ATOM	4097	CG2	THR	186	12.716	5.727	19.985	1.00	35.79
ATOM	4098	H	THR	186	15.156	8.726	20.408	1.00	0.00
ATOM	4099	HG1	THR	186	14.334	6.120	21.896	1.00	0.00
ATOM	4100	N	ARG	187	12.445	10.238	19.859	1.00	37.73
ATOM	4101	CA	ARG	187	11.343	11.190	19.909	1.00	39.50
ATOM	4102	C	ARG	187	11.448	12.278	18.858	1.00	38.23
ATOM	4103	O	ARG	187	10.611	13.175	18.807	1.00	39.79
ATOM	4104	CB	ARG	187	11.247	11.836	21.289	1.00	44.38
ATOM	4105	CG	ARG	187	10.908	10.875	22.405	1.00	50.95
ATOM	4106	CD	ARG	187	10.734	11.613	23.723	1.00	56.59
ATOM	4107	NE	ARG	187	10.395	10.698	24.811	1.00	62.33
ATOM	4108	CZ	ARG	187	9.188	10.164	25.004	1.00	65.53
ATOM	4109	NH1	ARG	187	8.182	10.453	24.180	1.00	67.23
ATOM	4110	NH2	ARG	187	8.986	9.330	26.020	1.00	66.84
ATOM	4111	H	ARG	187	13.336	10.509	20.136	1.00	0.00
ATOM	4112	HE	ARG	187	11.140	10.504	25.428	1.00	0.00
ATOM	4113	HH1	ARG	187	8.325	11.070	23.402	1.00	0.00
ATOM	4114	HH2	ARG	187	7.264	10.070	24.301	1.00	0.00
ATOM	4115	HH21	ARG	187	9.734	9.106	26.652	1.00	0.00
ATOM	4116	HH22	ARG	187	8.092	8.918	26.234	1.00	0.00
ATOM	4117	N	ARG	188	12.508	12.239	18.063	1.00	35.90
ATOM	4118	CA	ARG	188	12.705	13.227	17.012	1.00	33.59
ATOM	4119	C	ARG	188	13.601	12.674	15.932	1.00	29.51
ATOM	4120	O	ARG	188	14.695	12.196	16.217	1.00	29.73
ATOM	4121	CB	ARG	188	13.291	14.521	17.562	1.00	37.14
ATOM	4122	CG	ARG	188	14.264	14.366	18.711	1.00	41.29
ATOM	4123	CD	ARG	188	13.561	14.599	20.032	1.00	44.24
ATOM	4124	NE	ARG	188	12.931	15.919	20.073	1.00	48.74
ATOM	4125	CZ	ARG	188	13.539	17.033	20.477	1.00	50.43
ATOM	4126	NH1	ARG	188	14.805	16.993	20.881	1.00	50.97
ATOM	4127	NH2	ARG	188	12.882	18.189	20.471	1.00	51.40
ATOM	4128	H	ARG	188	13.195	11.549	18.176	1.00	0.00
ATOM	4129	HE	ARG	188	12.000	15.929	19.733	1.00	0.00
ATOM	4130	HH1	ARG	188	15.304	16.127	20.841	1.00	0.00
ATOM	4131	HH2	ARG	188	15.315	17.802	21.170	1.00	0.00
ATOM	4132	HH21	ARG	188	11.934	18.196	20.138	1.00	0.00
ATOM	4133	HH22	ARG	188	13.281	19.061	20.751	1.00	0.00
ATOM	4134	N	ASP	189	13.131	12.753	14.695	1.00	25.65
ATOM	4135	CA	ASP	189	13.862	12.234	13.553	1.00	22.81
ATOM	4136	C	ASP	189	13.154	12.654	12.270	1.00	23.81
ATOM	4137	O	ASP	189	12.023	13.155	12.304	1.00	23.21
ATOM	4138	CB	ASP	189	13.887	10.708	13.647	1.00	20.08

08/126

ATOM	4139	CG	ASP	189	14.761	10.058	12.602	1.00	18.91
ATOM	4140	OD1	ASP	189	15.611	10.723	11.986	1.00	20.62
ATOM	4141	OD2	ASP	189	14.614	8.844	12.416	1.00	19.86
ATOM	4142	H	ASP	189	12.252	13.168	14.556	1.00	0.00
ATOM	4143	N	SER	190	13.857	12.516	11.150	1.00	24.35
ATOM	4144	CA	SER	190	13.320	12.828	9.838	1.00	23.42
ATOM	4145	C	SER	190	12.369	11.686	9.491	1.00	22.61
ATOM	4146	O	SER	190	12.163	10.771	10.287	1.00	23.32
ATOM	4147	CB	SER	190	14.453	12.866	8.813	1.00	24.97
ATOM	4148	OG	SER	190	15.566	13.603	9.286	1.00	28.00
ATOM	4149	H	SER	190	14.782	12.210	11.188	1.00	0.00
ATOM	4150	HG	SER	190	15.281	14.447	9.652	1.00	0.00
ATOM	4151	N	CYS	191	11.822	11.701	8.288	1.00	21.46
ATOM	4152	CA	CYS	191	10.915	10.647	7.905	1.00	20.84
ATOM	4153	C	CYS	191	10.715	10.635	6.393	1.00	22.39
ATOM	4154	O	CYS	191	11.327	11.428	5.678	1.00	22.92
ATOM	4155	CB	CYS	191	9.602	10.850	8.643	1.00	20.34
ATOM	4156	SG	CYS	191	8.767	9.295	9.032	1.00	21.01
ATOM	4157	H	CYS	191	11.946	12.453	7.666	1.00	0.00
ATOM	4158	N	GLN	192	9.885	9.723	5.894	1.00	23.45
ATOM	4159	CA	GLN	192	9.636	9.632	4.455	1.00	23.39
ATOM	4160	C	GLN	192	9.078	10.970	3.979	1.00	21.24
ATOM	4161	O	GLN	192	8.166	11.515	4.584	1.00	21.78
ATOM	4162	CB	GLN	192	8.642	8.506	4.147	1.00	26.70
ATOM	4163	CG	GLN	192	8.939	7.167	4.837	1.00	32.08
ATOM	4164	CD	GLN	192	10.274	6.551	4.427	1.00	35.71
ATOM	4165	OE1	GLN	192	10.975	5.943	5.247	1.00	37.07
ATOM	4166	NE2	GLN	192	10.628	6.696	3.150	1.00	36.78
ATOM	4167	H	GLN	192	9.409	9.130	6.517	1.00	0.00
ATOM	4168	HE21	GLN	192	10.052	7.165	2.521	1.00	0.00
ATOM	4169	HE22	GLN	192	11.495	6.295	2.921	1.00	0.00
ATOM	4170	N	GLY	193	9.650	11.520	2.920	1.00	20.25
ATOM	4171	CA	GLY	193	9.169	12.796	2.428	1.00	20.12
ATOM	4172	C	GLY	193	10.047	13.950	2.873	1.00	20.12
ATOM	4173	O	GLY	193	9.924	15.068	2.348	1.00	21.70
ATOM	4174	H	GLY	193	10.397	11.087	2.481	1.00	0.00
ATOM	4175	N	ASP	194	10.887	13.698	3.874	1.00	18.41
ATOM	4176	CA	ASP	194	11.816	14.701	4.380	1.00	16.56
ATOM	4177	C	ASP	194	13.115	14.614	3.592	1.00	16.44
ATOM	4178	O	ASP	194	13.831	15.599	3.475	1.00	16.99
ATOM	4179	CB	ASP	194	12.120	14.479	5.864	1.00	15.81
ATOM	4180	CG	ASP	194	10.983	14.907	6.775	1.00	15.83
ATOM	4181	OD1	ASP	194	10.415	16.000	6.579	1.00	16.34
ATOM	4182	OD2	ASP	194	10.670	14.152	7.715	1.00	16.46
ATOM	4183	H	ASP	194	10.913	12.837	4.333	1.00	0.00
ATOM	4184	N	SER	195	13.425	13.422	3.080	1.00	16.86
ATOM	4185	CA	SER	195	14.634	13.170	2.299	1.00	16.92
ATOM	4186	C	SER	195	14.981	14.332	1.407	1.00	17.31
ATOM	4187	O	SER	195	14.110	14.889	0.752	1.00	17.68
ATOM	4188	CB	SER	195	14.471	11.926	1.438	1.00	19.23
ATOM	4189	OG	SER	195	14.661	10.742	2.196	1.00	20.26
ATOM	4190	H	SER	195	12.817	12.703	3.288	1.00	0.00
ATOM	4191	N	GLY	196	16.259	14.695	1.398	1.00	19.31
ATOM	4192	CA	GLY	196	16.727	15.818	0.602	1.00	19.48
ATOM	4193	C	GLY	196	16.723	17.106	1.406	1.00	19.76
ATOM	4194	O	GLY	196	17.452	18.045	1.089	1.00	21.35
ATOM	4195	H	GLY	196	16.901	14.173	1.911	1.00	0.00
ATOM	4196	N	GLY	197	15.944	17.117	2.486	1.00	19.10
ATOM	4197	CA	GLY	197	15.816	18.286	3.340	1.00	18.62
ATOM	4198	C	GLY	197	17.076	18.701	4.064	1.00	18.16
ATOM	4199	O	GLY	197	17.993	17.891	4.219	1.00	20.19
ATOM	4200	H	GLY	197	15.409	16.346	2.744	1.00	0.00
ATOM	4201	N	PRO	198	17.132	19.947	4.562	1.00	16.00

09/116

ATOM	4202	CA	PRO	198	18.304	20.452	5.269	1.00	15.35
ATOM	4203	C	PRO	198	18.377	20.157	6.760	1.00	16.57
ATOM	4204	O	PRO	198	17.356	19.989	7.435	1.00	15.77
ATOM	4205	CB	PRO	198	18.203	21.951	5.028	1.00	13.89
ATOM	4206	CG	PRO	198	16.739	22.179	5.159	1.00	13.54
ATOM	4207	CD	PRO	198	16.146	21.026	4.363	1.00	15.18
ATOM	4208	N	LEU	199	19.617	20.050	7.236	1.00	18.13
ATOM	4209	CA	LEU	199	19.940	19.855	8.645	1.00	17.52
ATOM	4210	C	LEU	199	20.842	21.056	8.875	1.00	17.54
ATOM	4211	O	LEU	199	21.989	21.069	8.439	1.00	17.18
ATOM	4212	CB	LEU	199	20.742	18.570	8.892	1.00	16.40
ATOM	4213	CG	LEU	199	21.263	18.397	10.332	1.00	15.93
ATOM	4214	CD1	LEU	199	20.118	18.054	11.261	1.00	16.34
ATOM	4215	CD2	LEU	199	22.320	17.317	10.421	1.00	15.15
ATOM	4216	H	LEU	199	20.367	20.071	6.609	1.00	0.00
ATOM	4217	N	VAL	200	20.289	22.103	9.461	1.00	18.07
ATOM	4218	CA	VAL	200	21.065	23.297	9.714	1.00	20.40
ATOM	4219	C	VAL	200	21.463	23.352	11.173	1.00	23.18
ATOM	4220	O	VAL	200	20.731	22.868	12.032	1.00	24.65
ATOM	4221	CB	VAL	200	20.263	24.556	9.379	1.00	20.22
ATOM	4222	CG1	VAL	200	20.014	24.629	7.891	1.00	20.48
ATOM	4223	CG2	VAL	200	18.952	24.552	10.136	1.00	20.54
ATOM	4224	H	VAL	200	19.381	21.997	9.815	1.00	0.00
ATOM	4225	N	CYS	201	22.642	23.901	11.440	1.00	25.85
ATOM	4226	CA	CYS	201	23.136	24.055	12.802	1.00	28.81
ATOM	4227	C	CYS	201	23.606	25.503	12.958	1.00	32.04
ATOM	4228	O	CYS	201	24.201	26.076	12.033	1.00	31.12
ATOM	4229	CB	CYS	201	24.296	23.101	13.078	1.00	27.50
ATOM	4230	SG	CYS	201	23.991	21.365	12.642	1.00	28.45
ATOM	4231	H	CYS	201	23.184	24.212	10.689	1.00	0.00
ATOM	4232	N	LYS	202	23.315	26.102	14.109	1.00	36.39
ATOM	4233	CA	LYS	202	23.703	27.486	14.366	1.00	40.44
ATOM	4234	C	LYS	202	25.145	27.570	14.860	1.00	42.60
ATOM	4235	O	LYS	202	25.418	27.316	16.034	1.00	44.17
ATOM	4236	CB	LYS	202	22.754	28.125	15.387	1.00	41.49
ATOM	4237	CG	LYS	202	22.830	29.646	15.459	1.00	42.16
ATOM	4238	CD	LYS	202	21.684	30.197	16.293	1.00	43.06
ATOM	4239	CE	LYS	202	21.756	31.713	16.455	1.00	43.50
ATOM	4240	NZ	LYS	202	21.441	32.499	15.227	1.00	42.33
ATOM	4241	H	LYS	202	22.862	25.604	14.820	1.00	0.00
ATOM	4242	HZ1	LYS	202	20.477	32.317	14.896	1.00	0.00
ATOM	4243	HZ2	LYS	202	22.103	32.342	14.439	1.00	0.00
ATOM	4244	HZ3	LYS	202	21.533	33.510	15.496	1.00	0.00
ATOM	4245	N	VAL	203	26.063	27.905	13.960	1.00	43.88
ATOM	4246	CA	VAL	203	27.476	28.023	14.302	1.00	45.25
ATOM	4247	C	VAL	203	27.858	29.496	14.406	1.00	46.24
ATOM	4248	O	VAL	203	27.961	30.196	13.393	1.00	47.09
ATOM	4249	CB	VAL	203	28.364	27.306	13.257	1.00	45.79
ATOM	4250	CG1	VAL	203	29.827	27.675	13.441	1.00	46.99
ATOM	4251	CG2	VAL	203	28.202	25.803	13.391	1.00	47.34
ATOM	4252	H	VAL	203	25.766	28.123	13.055	1.00	0.00
ATOM	4253	N	ASN	204	28.044	29.960	15.640	1.00	46.28
ATOM	4254	CA	ASN	204	28.400	31.350	15.902	1.00	46.85
ATOM	4255	C	ASN	204	27.378	32.287	15.284	1.00	46.73
ATOM	4256	O	ASN	204	27.703	33.094	14.415	1.00	47.28
ATOM	4257	CB	ASN	204	29.794	31.669	15.354	1.00	49.65
ATOM	4258	CG	ASN	204	30.892	31.016	16.156	1.00	52.80
ATOM	4259	OD1	ASN	204	30.665	30.572	17.280	1.00	55.04
ATOM	4260	ND2	ASN	204	32.092	30.946	15.586	1.00	53.78
ATOM	4261	H	ASN	204	27.947	29.339	16.389	1.00	0.00
ATOM	4262	HD21	ASN	204	32.202	31.311	14.686	1.00	0.00
ATOM	4263	HD22	ASN	204	32.806	30.530	16.108	1.00	0.00
ATOM	4264	N	GLY	205	26.122	32.127	15.686	1.00	45.97

90/126

ATOM	4265	CA	GLY	205	25.067	32.979	15.169	1.00	44.30
ATOM	4266	C	GLY	205	24.561	32.676	13.769	1.00	43.64
ATOM	4267	O	GLY	205	23.394	32.956	13.476	1.00	44.87
ATOM	4268	H	GLY	205	25.926	31.422	16.335	1.00	0.00
ATOM	4269	N	THR	206	25.399	32.075	12.927	1.00	41.35
ATOM	4270	CA	THR	206	25.030	31.746	11.551	1.00	38.93
ATOM	4271	C	THR	206	24.428	30.340	11.403	1.00	37.00
ATOM	4272	O	THR	206	24.790	29.417	12.137	1.00	37.46
ATOM	4273	CB	THR	206	26.270	31.870	10.637	1.00	38.86
ATOM	4274	OG1	THR	206	26.847	33.167	10.810	1.00	39.45
ATOM	4275	CG2	THR	206	25.900	31.703	9.180	1.00	39.45
ATOM	4276	H	THR	206	26.322	31.854	13.177	1.00	0.00
ATOM	4277	HG1	THR	206	27.742	33.163	10.462	1.00	0.00
ATOM	4278	N	TRP	207	23.470	30.197	10.492	1.00	33.39
ATOM	4279	CA	TRP	207	22.848	28.902	10.232	1.00	30.05
ATOM	4280	C	TRP	207	23.559	28.240	9.065	1.00	29.13
ATOM	4281	O	TRP	207	23.426	28.682	7.917	1.00	29.40
ATOM	4282	CB	TRP	207	21.373	29.063	9.872	1.00	28.31
ATOM	4283	CG	TRP	207	20.495	29.391	11.021	1.00	27.19
ATOM	4284	CD1	TRP	207	19.933	30.598	11.299	1.00	27.65
ATOM	4285	CD2	TRP	207	20.034	28.489	12.031	1.00	26.85
ATOM	4286	NE1	TRP	207	19.143	30.505	12.418	1.00	27.40
ATOM	4287	CE2	TRP	207	19.190	29.220	12.888	1.00	26.98
ATOM	4288	CE3	TRP	207	20.251	27.130	12.294	1.00	27.81
ATOM	4289	CZ2	TRP	207	18.560	28.641	13.993	1.00	27.99
ATOM	4290	CZ3	TRP	207	19.626	26.551	13.389	1.00	26.42
ATOM	4291	CH2	TRP	207	18.789	27.307	14.225	1.00	27.81
ATOM	4292	H	TRP	207	23.170	30.965	9.966	1.00	0.00
ATOM	4293	HE1	TRP	207	18.566	31.220	12.761	1.00	0.00
ATOM	4294	N	LEU	208	24.317	27.191	9.356	1.00	28.79
ATOM	4295	CA	LEU	208	25.049	26.460	8.322	1.00	28.46
ATOM	4296	C	LEU	208	24.355	25.126	8.054	1.00	27.27
ATOM	4297	O	LEU	208	23.770	24.538	8.967	1.00	27.37
ATOM	4298	CB	LEU	208	26.479	26.183	8.783	1.00	28.49
ATOM	4299	CG	LEU	208	27.330	27.363	9.236	1.00	28.03
ATOM	4300	CD1	LEU	208	28.607	26.835	9.832	1.00	27.65
ATOM	4301	CD2	LEU	208	27.623	28.280	8.064	1.00	28.25
ATOM	4302	H	LEU	208	24.363	26.872	10.282	1.00	0.00
ATOM	4303	N	GLN	209	24.412	24.641	6.816	1.00	24.85
ATOM	4304	CA	GLN	209	23.782	23.363	6.525	1.00	23.01
ATOM	4305	C	GLN	209	24.725	22.223	6.864	1.00	22.16
ATOM	4306	O	GLN	209	25.691	21.968	6.149	1.00	21.33
ATOM	4307	CB	GLN	209	23.328	23.256	5.074	1.00	22.73
ATOM	4308	CG	GLN	209	22.667	21.912	4.789	1.00	22.97
ATOM	4309	CD	GLN	209	21.673	21.954	3.649	1.00	22.55
ATOM	4310	OE1	GLN	209	21.494	22.978	2.987	1.00	20.96
ATOM	4311	NE2	GLN	209	20.998	20.838	3.432	1.00	23.79
ATOM	4312	H	GLN	209	24.836	25.190	6.128	1.00	0.00
ATOM	4313	HE21GLN		209	21.180	20.072	4.017	1.00	0.00
ATOM	4314	HE22GLN		209	20.359	20.831	2.690	1.00	0.00
ATOM	4315	N	ALA	210	24.443	21.565	7.982	1.00	21.93
ATOM	4316	CA	ALA	210	25.237	20.450	8.467	1.00	22.31
ATOM	4317	C	ALA	210	25.106	19.185	7.604	1.00	23.21
ATOM	4318	O	ALA	210	26.094	18.481	7.383	1.00	23.35
ATOM	4319	CB	ALA	210	24.868	20.152	9.914	1.00	21.07
ATOM	4320	H	ALA	210	23.675	21.852	8.508	1.00	0.00
ATOM	4321	N	GLY	211	23.904	18.909	7.101	1.00	22.83
ATOM	4322	CA	GLY	211	23.701	17.716	6.289	1.00	20.07
ATOM	4323	C	GLY	211	22.469	17.716	5.399	1.00	19.23
ATOM	4324	O	GLY	211	21.763	18.727	5.283	1.00	19.11
ATOM	4325	H	GLY	211	23.164	19.523	7.299	1.00	0.00
ATOM	4326	N	VAL	212	22.235	16.577	4.751	1.00	18.04
ATOM	4327	CA	VAL	212	21.101	16.378	3.844	1.00	16.65

ATOM	4328	C	VAL	212	20.419	15.061	4.237	1.00	16.31
ATOM	4329	O	VAL	212	21.072	14.024	4.277	1.00	17.10
ATOM	4330	CB	VAL	212	21.594	16.278	2.372	1.00	15.40
ATOM	4331	CG1	VAL	212	20.449	15.937	1.433	1.00	14.08
ATOM	4332	CG2	VAL	212	22.244	17.578	1.956	1.00	14.54
ATOM	4333	H	VAL	212	22.869	15.846	4.878	1.00	0.00
ATOM	4334	N	VAL	213	19.124	15.102	4.546	1.00	14.65
ATOM	4335	CA	VAL	213	18.396	13.898	4.949	1.00	13.73
ATOM	4336	C	VAL	213	18.564	12.817	3.883	1.00	14.82
ATOM	4337	O	VAL	213	18.180	13.014	2.734	1.00	15.88
ATOM	4338	CB	VAL	213	16.896	14.184	5.187	1.00	12.90
ATOM	4339	CG1	VAL	213	16.255	13.004	5.882	1.00	11.62
ATOM	4340	CG2	VAL	213	16.713	15.440	6.032	1.00	11.42
ATOM	4341	H	VAL	213	18.684	15.976	4.484	1.00	0.00
ATOM	4342	N	SER	214	19.139	11.682	4.271	1.00	16.75
ATOM	4343	CA	SER	214	19.404	10.588	3.339	1.00	19.13
ATOM	4344	C	SER	214	18.709	9.256	3.635	1.00	20.20
ATOM	4345	O	SER	214	17.930	8.774	2.814	1.00	22.54
ATOM	4346	CB	SER	214	20.925	10.384	3.203	1.00	19.61
ATOM	4347	OG	SER	214	21.261	9.219	2.463	1.00	19.40
ATOM	4348	H	SER	214	19.403	11.538	5.205	1.00	0.00
ATOM	4349	HG	SER	214	21.080	9.374	1.529	1.00	0.00
ATOM	4350	N	TRP	215	19.001	8.642	4.775	1.00	19.88
ATOM	4351	CA	TRP	215	18.376	7.368	5.098	1.00	20.79
ATOM	4352	C	TRP	215	18.356	7.020	6.584	1.00	22.87
ATOM	4353	O	TRP	215	18.675	7.848	7.433	1.00	23.73
ATOM	4354	CB	TRP	215	19.008	6.234	4.278	1.00	19.45
ATOM	4355	CG	TRP	215	20.438	5.937	4.582	1.00	19.03
ATOM	4356	CD1	TRP	215	21.526	6.653	4.182	1.00	19.67
ATOM	4357	CD2	TRP	215	20.946	4.808	5.307	1.00	19.39
ATOM	4358	NE1	TRP	215	22.681	6.037	4.606	1.00	19.10
ATOM	4359	CE2	TRP	215	22.353	4.903	5.298	1.00	18.82
ATOM	4360	CE3	TRP	215	20.347	3.722	5.960	1.00	20.69
ATOM	4361	CZ2	TRP	215	23.173	3.953	5.918	1.00	19.47
ATOM	4362	CZ3	TRP	215	21.165	2.777	6.578	1.00	19.60
ATOM	4363	CH2	TRP	215	22.561	2.901	6.550	1.00	18.90
ATOM	4364	H	TRP	215	19.602	9.070	5.419	1.00	0.00
ATOM	4365	HE1	TRP	215	23.591	6.361	4.415	1.00	0.00
ATOM	4366	N	GLY	216	17.937	5.800	6.890	1.00	24.62
ATOM	4367	CA	GLY	216	17.860	5.346	8.267	1.00	28.30
ATOM	4368	C	GLY	216	16.909	4.166	8.314	1.00	31.10
ATOM	4369	O	GLY	216	16.172	3.942	7.356	1.00	32.33
ATOM	4370	H	GLY	216	17.638	5.174	6.197	1.00	0.00
ATOM	4371	N	GLU	217	16.910	3.415	9.408	1.00	32.47
ATOM	4372	CA	GLU	217	16.031	2.257	9.530	1.00	33.88
ATOM	4373	C	GLU	217	14.708	2.649	10.185	1.00	33.79
ATOM	4374	O	GLU	217	14.481	2.364	11.360	1.00	35.74
ATOM	4375	CB	GLU	217	16.721	1.163	10.350	1.00	36.85
ATOM	4376	CG	GLU	217	18.154	0.887	9.923	1.00	41.77
ATOM	4377	CD	GLU	217	18.363	-0.527	9.416	1.00	45.44
ATOM	4378	OE1	GLU	217	19.431	-1.107	9.718	1.00	47.03
ATOM	4379	OE2	GLU	217	17.477	-1.050	8.701	1.00	47.68
ATOM	4380	H	GLU	217	17.484	3.657	10.163	1.00	0.00
ATOM	4381	N	GLY	219	13.827	3.294	9.428	1.00	32.19
ATOM	4382	CA	GLY	219	12.550	3.707	9.985	1.00	30.79
ATOM	4383	C	GLY	219	12.676	5.040	10.700	1.00	30.03
ATOM	4384	O	GLY	219	13.785	5.469	11.022	1.00	29.00
ATOM	4385	H	GLY	219	14.049	3.494	8.494	1.00	0.00
ATOM	4386	N	CYS	220	11.541	5.686	10.958	1.00	29.77
ATOM	4387	CA	CYS	220	11.520	6.986	11.627	1.00	28.30
ATOM	4388	C	CYS	220	11.475	6.872	13.146	1.00	29.94
ATOM	4389	O	CYS	220	10.662	6.112	13.694	1.00	30.48
ATOM	4390	CB	CYS	220	10.333	7.808	11.144	1.00	23.84

ATOM	4391	SG	CYS	220	10.284	7.985	9.346	1.00	19.78
ATOM	4392	H	CYS	220	10.702	5.250	10.710	1.00	0.00
ATOM	4393	N	ALA	221	12.354	7.628	13.811	1.00	29.90
ATOM	4394	CA	ALA	221	12.458	7.650	15.267	1.00	29.71
ATOM	4395	C	ALA	221	12.549	6.227	15.810	1.00	31.10
ATOM	4396	O	ALA	221	11.733	5.809	16.637	1.00	32.62
ATOM	4397	CB	ALA	221	11.269	8.387	15.865	1.00	27.85
ATOM	4398	H	ALA	221	12.988	8.165	13.284	1.00	0.00
ATOM	4399	N	GLN	221A	13.537	5.481	15.322	1.00	32.09
ATOM	4400	CA	GLN	221A	13.726	4.092	15.729	1.00	33.10
ATOM	4401	C	GLN	221A	14.888	3.817	16.685	1.00	31.87
ATOM	4402	O	GLN	221A	15.994	4.348	16.529	1.00	31.97
ATOM	4403	CB	GLN	221A	13.822	3.177	14.502	1.00	35.62
ATOM	4404	CG	GLN	221A	12.486	2.943	13.800	1.00	39.24
ATOM	4405	CD	GLN	221A	11.448	2.312	14.714	1.00	41.06
ATOM	4406	OE1	GLN	221A	11.542	1.133	15.059	1.00	42.09
ATOM	4407	NE2	GLN	221A	10.465	3.102	15.128	1.00	42.62
ATOM	4408	H	GLN	221A	14.168	5.880	14.682	1.00	0.00
ATOM	4409	HE21	GLN	221A	10.471	4.045	14.843	1.00	0.00
ATOM	4410	HE22	GLN	221A	9.774	2.726	15.705	1.00	0.00
ATOM	4411	N	PRO	222	14.637	2.970	17.694	1.00	30.49
ATOM	4412	CA	PRO	222	15.579	2.549	18.735	1.00	29.25
ATOM	4413	C	PRO	222	16.917	2.030	18.200	1.00	27.27
ATOM	4414	O	PRO	222	16.962	1.005	17.525	1.00	27.31
ATOM	4415	CB	PRO	222	14.803	1.445	19.449	1.00	30.64
ATOM	4416	CG	PRO	222	13.390	1.931	19.357	1.00	30.41
ATOM	4417	CD	PRO	222	13.306	2.373	17.926	1.00	30.24
ATOM	4418	N	ASN	223	17.997	2.730	18.549	1.00	25.52
ATOM	4419	CA	ASN	223	19.360	2.375	18.132	1.00	23.83
ATOM	4420	C	ASN	223	19.575	2.522	16.627	1.00	22.48
ATOM	4421	O	ASN	223	20.450	1.865	16.054	1.00	21.25
ATOM	4422	CB	ASN	223	19.720	0.938	18.543	1.00	23.80
ATOM	4423	CG	ASN	223	19.586	0.697	20.031	1.00	23.39
ATOM	4424	OD1	ASN	223	18.854	-0.191	20.461	1.00	22.89
ATOM	4425	ND2	ASN	223	20.298	1.479	20.826	1.00	24.48
ATOM	4426	H	ASN	223	17.842	3.514	19.109	1.00	0.00
ATOM	4427	HD21	ASN	223	20.885	2.147	20.439	1.00	0.00
ATOM	4428	HD22	ASN	223	20.183	1.323	21.787	1.00	0.00
ATOM	4429	N	ARG	224	18.778	3.379	15.993	1.00	20.52
ATOM	4430	CA	ARG	224	18.876	3.604	14.556	1.00	18.58
ATOM	4431	C	ARG	224	18.616	5.068	14.214	1.00	17.70
ATOM	4432	O	ARG	224	17.619	5.409	13.558	1.00	16.97
ATOM	4433	CB	ARG	224	17.871	2.725	13.813	1.00	18.37
ATOM	4434	CG	ARG	224	18.050	1.248	14.027	1.00	17.65
ATOM	4435	CD	ARG	224	19.355	0.757	13.460	1.00	18.09
ATOM	4436	NE	ARG	224	19.376	-0.701	13.454	1.00	19.29
ATOM	4437	CZ	ARG	224	19.832	-1.452	14.451	1.00	18.79
ATOM	4438	NH1	ARG	224	20.326	-0.886	15.549	1.00	17.88
ATOM	4439	NH2	ARG	224	19.748	-2.774	14.371	1.00	18.85
ATOM	4440	H	ARG	224	18.051	3.864	16.440	1.00	0.00
ATOM	4441	HE	ARG	224	19.042	-1.142	12.632	1.00	0.00
ATOM	4442	HH11	ARG	224	20.402	0.110	15.662	1.00	0.00
ATOM	4443	HH12	ARG	224	20.706	-1.467	16.281	1.00	0.00
ATOM	4444	HH21	ARG	224	19.350	-3.266	13.576	1.00	0.00
ATOM	4445	HH22	ARG	224	20.101	-3.338	15.110	1.00	0.00
ATOM	4446	N	PRO	225	19.513	5.956	14.663	1.00	16.47
ATOM	4447	CA	PRO	225	19.378	7.388	14.401	1.00	15.04
ATOM	4448	C	PRO	225	19.333	7.699	12.906	1.00	13.83
ATOM	4449	O	PRO	225	19.834	6.927	12.080	1.00	13.63
ATOM	4450	CB	PRO	225	20.625	7.972	15.076	1.00	14.51
ATOM	4451	CG	PRO	225	21.616	6.867	14.995	1.00	13.40
ATOM	4452	CD	PRO	225	20.775	5.677	15.368	1.00	15.83
ATOM	4453	N	GLY	226	18.709	8.819	12.567	1.00	12.23

93/176

ATOM	4454	CA	GLY	226	18.614	9.210	11.178	1.00	12.07
ATOM	4455	C	GLY	226	19.983	9.560	10.654	1.00	13.32
ATOM	4456	O	GLY	226	20.770	10.217	11.333	1.00	14.09
ATOM	4457	H	GLY	226	18.298	9.413	13.228	1.00	0.00
ATOM	4458	N	ILE	227	20.277	9.110	9.447	1.00	15.16
ATOM	4459	CA	ILE	227	21.556	9.377	8.812	1.00	16.28
ATOM	4460	C	ILE	227	21.389	10.501	7.788	1.00	17.99
ATOM	4461	O	ILE	227	20.360	10.587	7.098	1.00	20.57
ATOM	4462	CB	ILE	227	22.074	8.117	8.133	1.00	15.84
ATOM	4463	CG1	ILE	227	22.294	7.042	9.197	1.00	16.01
ATOM	4464	CG2	ILE	227	23.333	8.417	7.345	1.00	17.93
ATOM	4465	H	ILE	227	19.608	8.622	8.929	1.00	0.00
ATOM	4466	CD	ILE	227	22.887	5.775	8.672	1.00	16.80
ATOM	4467	N	TYR	228	22.369	11.394	7.727	1.00	16.13
ATOM	4468	CA	TYR	228	22.324	12.523	6.801	1.00	15.83
ATOM	4469	C	TYR	228	23.617	12.529	5.995	1.00	17.09
ATOM	4470	O	TYR	228	24.601	11.914	6.408	1.00	19.62
ATOM	4471	CB	TYR	228	22.195	13.852	7.566	1.00	13.00
ATOM	4472	CG	TYR	228	21.014	13.938	8.504	1.00	10.84
ATOM	4473	CD1	TYR	228	20.874	13.032	9.549	1.00	11.77
ATOM	4474	CD2	TYR	228	20.019	14.904	8.332	1.00	10.47
ATOM	4475	CE1	TYR	228	19.776	13.068	10.399	1.00	13.52
ATOM	4476	CE2	TYR	228	18.902	14.954	9.187	1.00	10.67
ATOM	4477	CZ	TYR	228	18.791	14.024	10.216	1.00	12.88
ATOM	4478	OH	TYR	228	17.701	14.003	11.059	1.00	13.55
ATOM	4479	H	TYR	228	23.129	11.298	8.316	1.00	0.00
ATOM	4480	HH	TYR	228	17.659	13.151	11.517	1.00	0.00
ATOM	4481	N	THR	229	23.603	13.181	4.836	1.00	15.76
ATOM	4482	CA	THR	229	24.788	13.270	3.999	1.00	14.93
ATOM	4483	C	THR	229	25.632	14.408	4.519	1.00	15.41
ATOM	4484	O	THR	229	25.136	15.520	4.724	1.00	17.46
ATOM	4485	CB	THR	229	24.450	13.526	2.534	1.00	14.04
ATOM	4486	OG1	THR	229	23.587	12.490	2.061	1.00	16.27
ATOM	4487	CG2	THR	229	25.714	13.509	1.707	1.00	12.69
ATOM	4488	H	THR	229	22.782	13.559	4.507	1.00	0.00
ATOM	4489	HG1	THR	229	23.376	12.632	1.126	1.00	0.00
ATOM	4490	N	ARG	230	26.908	14.124	4.733	1.00	14.43
ATOM	4491	CA	ARG	230	27.851	15.094	5.257	1.00	14.26
ATOM	4492	C	ARG	230	28.215	16.119	4.185	1.00	14.69
ATOM	4493	O	ARG	230	28.953	15.826	3.241	1.00	13.22
ATOM	4494	CB	ARG	230	29.063	14.332	5.771	1.00	16.36
ATOM	4495	CG	ARG	230	30.115	15.164	6.396	1.00	18.75
ATOM	4496	CD	ARG	230	30.927	14.395	7.377	1.00	22.90
ATOM	4497	NE	ARG	230	30.362	14.535	8.709	1.00	26.74
ATOM	4498	CZ	ARG	230	30.512	13.649	9.682	1.00	29.23
ATOM	4499	NH1	ARG	230	31.214	12.547	9.457	1.00	31.14
ATOM	4500	NH2	ARG	230	29.974	13.869	10.875	1.00	30.54
ATOM	4501	H	ARG	230	27.249	13.236	4.480	1.00	0.00
ATOM	4502	HE	ARG	230	29.832	15.330	8.865	1.00	0.00
ATOM	4503	HH11	ARG	230	31.605	12.365	8.548	1.00	0.00
ATOM	4504	HH12	ARG	230	31.295	11.854	10.170	1.00	0.00
ATOM	4505	HH21	ARG	230	29.433	14.689	11.076	1.00	0.00
ATOM	4506	HH22	ARG	230	30.020	13.174	11.603	1.00	0.00
ATOM	4507	N	VAL	231	27.693	17.330	4.356	1.00	16.32
ATOM	4508	CA	VAL	231	27.890	18.422	3.408	1.00	18.70
ATOM	4509	C	VAL	231	29.314	18.873	3.134	1.00	20.24
ATOM	4510	O	VAL	231	29.734	18.880	1.976	1.00	21.32
ATOM	4511	CB	VAL	231	27.033	19.655	3.779	1.00	19.84
ATOM	4512	CG1	VAL	231	27.144	20.732	2.709	1.00	19.33
ATOM	4513	CG2	VAL	231	25.585	19.244	3.929	1.00	21.64
ATOM	4514	H	VAL	231	27.171	17.503	5.169	1.00	0.00
ATOM	4515	N	THR	232	30.046	19.288	4.164	1.00	21.65
ATOM	4516	CA	THR	232	31.422	19.744	3.956	1.00	23.80

94/176

ATL	4517	C	THR	232	32.240	18.727	3.171	1.00	25.14
ATOM	4518	O	THR	232	33.159	19.095	2.425	1.00	27.75
ATOM	4519	CB	THR	232	32.173	20.107	5.270	1.00	24.30
ATOM	4520	OG1	THR	232	32.263	18.971	6.134	1.00	23.79
ATOM	4521	CG2	THR	232	31.484	21.237	5.999	1.00	24.90
ATOM	4522	H	THR	232	29.663	19.242	5.059	1.00	0.00
ATOM	4523	HG1	THR	232	32.896	19.290	6.796	1.00	0.00
ATOM	4524	N	TYR	233	31.859	17.462	3.283	1.00	24.09
ATOM	4525	CA	TYR	233	32.544	16.393	2.577	1.00	23.16
ATOM	4526	C	TYR	233	32.434	16.581	1.063	1.00	22.61
ATOM	4527	O	TYR	233	33.395	16.365	0.328	1.00	22.48
ATOM	4528	CB	TYR	233	31.939	15.059	2.976	1.00	23.60
ATOM	4529	CG	TYR	233	32.714	13.869	2.492	1.00	23.86
ATOM	4530	CD1	TYR	233	33.472	13.104	3.376	1.00	24.73
ATOM	4531	CD2	TYR	233	32.659	13.477	1.163	1.00	24.25
ATOM	4532	CE1	TYR	233	34.149	11.977	2.947	1.00	24.67
ATOM	4533	CE2	TYR	233	33.331	12.354	0.722	1.00	25.89
ATOM	4534	CZ	TYR	233	34.071	11.607	1.617	1.00	25.90
ATOM	4535	OH	TYR	233	34.704	10.469	1.181	1.00	28.31
ATOM	4536	H	TYR	233	31.090	17.239	3.843	1.00	0.00
ATOM	4537	HH	TYR	233	34.339	10.244	0.324	1.00	0.00
ATOM	4538	N	TYR	234	31.256	16.969	0.592	1.00	22.65
ATOM	4539	CA	TYR	234	31.055	17.172	-0.835	1.00	21.87
ATOM	4540	C	TYR	234	31.141	18.637	-1.238	1.00	24.66
ATOM	4541	O	TYR	234	30.781	18.995	-2.367	1.00	27.00
ATOM	4542	CB	TYR	234	29.731	16.550	-1.293	1.00	16.86
ATOM	4543	CG	TYR	234	29.766	15.044	-1.260	1.00	12.21
ATOM	4544	CD1	TYR	234	29.155	14.327	-0.229	1.00	9.50
ATOM	4545	CD2	TYR	234	30.474	14.334	-2.224	1.00	10.43
ATOM	4546	CE1	TYR	234	29.256	12.944	-0.159	1.00	8.00
ATOM	4547	CE2	TYR	234	30.583	12.953	-2.164	1.00	9.47
ATOM	4548	CZ	TYR	234	29.975	12.264	-1.130	1.00	9.09
ATOM	4549	OH	TYR	234	30.119	10.900	-1.069	1.00	8.89
ATOM	4550	H	TYR	234	30.527	17.138	1.235	1.00	0.00
ATOM	4551	HH	TYR	234	30.936	10.600	-1.455	1.00	0.00
ATOM	4552	N	LEU	235	31.692	19.469	-0.351	1.00	24.25
ATOM	4553	CA	LEU	235	31.836	20.901	-0.610	1.00	23.41
ATOM	4554	C	LEU	235	32.494	21.264	-1.930	1.00	23.12
ATOM	4555	O	LEU	235	31.975	22.083	-2.682	1.00	22.72
ATOM	4556	CB	LEU	235	32.582	21.574	0.527	1.00	22.99
ATOM	4557	CG	LEU	235	31.627	22.164	1.554	1.00	23.30
ATOM	4558	CD1	LEU	235	32.420	22.847	2.636	1.00	24.61
ATOM	4559	CD2	LEU	235	30.701	23.152	0.871	1.00	22.99
ATOM	4560	H	LEU	235	32.004	19.104	0.505	1.00	0.00
ATOM	4561	N	ASP	236	33.641	20.664	-2.207	1.00	24.16
ATOM	4562	CA	ASP	236	34.352	20.932	-3.444	1.00	26.20
ATOM	4563	C	ASP	236	33.496	20.564	-4.642	1.00	26.26
ATOM	4564	O	ASP	236	33.428	21.315	-5.616	1.00	27.92
ATOM	4565	CB	ASP	236	35.682	20.171	-3.479	1.00	29.63
ATOM	4566	CG	ASP	236	36.648	20.617	-2.383	1.00	32.31
ATOM	4567	OD1	ASP	236	37.623	19.884	-2.121	1.00	33.53
ATOM	4568	OD2	ASP	236	36.446	21.692	-1.770	1.00	31.95
ATOM	4569	H	ASP	236	34.045	20.070	-1.544	1.00	0.00
ATOM	4570	N	TRP	237	32.818	19.425	-4.571	1.00	25.04
ATOM	4571	CA	TRP	237	31.960	19.009	-5.680	1.00	24.18
ATOM	4572	C	TRP	237	30.837	20.029	-5.870	1.00	23.27
ATOM	4573	O	TRP	237	30.589	20.493	-6.981	1.00	21.58
ATOM	4574	CB	TRP	237	31.378	17.617	-5.432	1.00	23.73
ATOM	4575	CG	TRP	237	30.469	17.145	-6.528	1.00	22.17
ATOM	4576	CD1	TRP	237	30.836	16.592	-7.723	1.00	22.93
ATOM	4577	CD2	TRP	237	29.041	17.191	-6.529	1.00	21.54
ATOM	4578	NE1	TRP	237	29.722	16.293	-8.468	1.00	22.96
ATOM	4579	CE2	TRP	237	28.606	16.649	-7.756	1.00	22.37

95/126

ATOM	4580	CE3	TRP	237	28.083	17.640	-5.610	1.00	20.65
ATOM	4581	CZ2	TRP	237	27.253	16.544	-8.085	1.00	21.65
ATOM	4582	CZ3	TRP	237	26.746	17.535	-5.939	1.00	19.81
ATOM	4583	CH2	TRP	237	26.343	16.991	-7.167	1.00	20.64
ATOM	4584	H	TRP	237	32.895	18.884	-3.759	1.00	0.00
ATOM	4585	HE1	TRP	237	29.730	16.016	-9.414	1.00	0.00
ATOM	4586	N	ILE	238	30.185	20.391	-4.773	1.00	23.25
ATOM	4587	CA	ILE	238	29.117	21.371	-4.815	1.00	24.34
ATOM	4588	C	ILE	238	29.648	22.585	-5.556	1.00	26.65
ATOM	4589	O	ILE	238	29.093	22.997	-6.574	1.00	26.58
ATOM	4590	CB	ILE	238	28.706	21.803	-3.391	1.00	23.89
ATOM	4591	CG1	ILE	238	28.005	20.646	-2.673	1.00	24.52
ATOM	4592	CG2	ILE	238	27.819	23.042	-3.439	1.00	22.20
ATOM	4593	H	ILE	238	30.416	19.971	-3.925	1.00	0.00
ATOM	4594	CD	ILE	238	27.656	20.940	-1.222	1.00	24.29
ATOM	4595	N	HIS	239	30.792	23.077	-5.091	1.00	29.74
ATOM	4596	CA	HIS	239	31.436	24.254	-5.662	1.00	31.99
ATOM	4597	C	HIS	239	31.988	24.131	-7.063	1.00	33.26
ATOM	4598	O	HIS	239	32.538	25.099	-7.586	1.00	33.88
ATOM	4599	CB	HIS	239	32.503	24.791	-4.718	1.00	32.75
ATOM	4600	CG	HIS	239	31.933	25.432	-3.497	1.00	34.71
ATOM	4601	ND1	HIS	239	30.819	26.244	-3.540	1.00	36.23
ATOM	4602	CD2	HIS	239	32.293	25.357	-2.195	1.00	35.47
ATOM	4603	CE1	HIS	239	30.515	26.642	-2.318	1.00	36.77
ATOM	4604	NE2	HIS	239	31.395	26.117	-1.484	1.00	37.64
ATOM	4605	H	HIS	239	31.228	22.638	-4.336	1.00	0.00
ATOM	4606	HD1	HIS	239	30.354	26.506	-4.374	1.00	0.00
ATOM	4607	HE2	HIS	239	31.422	26.248	-0.511	1.00	0.00
ATOM	4608	N	HIS	240	31.857	22.951	-7.664	1.00	34.03
ATOM	4609	CA	HIS	240	32.309	22.746	-9.036	1.00	35.29
ATOM	4610	C	HIS	240	31.218	23.275	-9.972	1.00	35.13
ATOM	4611	O	HIS	240	31.440	23.469	-11.168	1.00	34.59
ATOM	4612	CB	HIS	240	32.543	21.255	-9.328	1.00	38.17
ATOM	4613	CG	HIS	240	33.767	20.677	-8.682	1.00	39.96
ATOM	4614	ND1	HIS	240	33.955	19.318	-8.536	1.00	40.42
ATOM	4615	CD2	HIS	240	34.870	21.266	-8.164	1.00	40.33
ATOM	4616	CE1	HIS	240	35.119	19.094	-7.955	1.00	40.87
ATOM	4617	NE2	HIS	240	35.694	20.258	-7.721	1.00	41.52
ATOM	4618	H	HIS	240	31.454	22.209	-7.176	1.00	0.00
ATOM	4619	HD1	HIS	240	33.335	18.625	-8.848	1.00	0.00
ATOM	4620	HE2	HIS	240	36.580	20.355	-7.300	1.00	0.00
ATOM	4621	N	TYR	241	30.027	23.479	-9.418	1.00	35.72
ATOM	4622	CA	TYR	241	28.894	23.968	-10.187	1.00	35.80
ATOM	4623	C	TYR	241	28.285	25.201	-9.528	1.00	38.33
ATOM	4624	O	TYR	241	27.910	26.149	-10.210	1.00	40.03
ATOM	4625	CB	TYR	241	27.835	22.873	-10.300	1.00	32.91
ATOM	4626	CG	TYR	241	28.385	21.545	-10.750	1.00	29.73
ATOM	4627	CD1	TYR	241	28.706	20.556	-9.827	1.00	28.95
ATOM	4628	CD2	TYR	241	28.584	21.277	-12.098	1.00	29.38
ATOM	4629	CE1	TYR	241	29.211	19.333	-10.236	1.00	29.05
ATOM	4630	CE2	TYR	241	29.086	20.055	-12.522	1.00	28.77
ATOM	4631	CZ	TYR	241	29.398	19.089	-11.586	1.00	30.04
ATOM	4632	OH	TYR	241	29.895	17.874	-12.006	1.00	33.89
ATOM	4633	H	TYR	241	29.878	23.277	-8.471	1.00	0.00
ATOM	4634	HH	TYR	241	29.959	17.872	-12.962	1.00	0.00
ATOM	4635	N	VAL	242	28.154	25.172	-8.206	1.00	40.62
ATOM	4636	CA	VAL	242	27.588	26.294	-7.475	1.00	42.41
ATOM	4637	C	VAL	242	28.696	27.295	-7.190	1.00	46.20
ATOM	4638	O	VAL	242	29.603	27.025	-6.400	1.00	46.31
ATOM	4639	CB	VAL	242	26.967	25.845	-6.142	1.00	41.94
ATOM	4640	CG1	VAL	242	26.193	26.992	-5.525	1.00	41.57
ATOM	4641	CG2	VAL	242	26.068	24.651	-6.359	1.00	42.14
ATOM	4642	H	VAL	242	28.450	24.382	-7.715	1.00	0.00

96/176

ATOM	4643	N	PRO	243	28.628	28.473	-7.817	1.00	49.97
ATOM	4644	CA	PRO	243	29.628	29.528	-7.641	1.00	53.66
ATOM	4645	C	PRO	243	29.573	30.216	-6.292	1.00	56.18
ATOM	4646	O	PRO	243	28.499	30.564	-5.797	1.00	55.01
ATOM	4647	CB	PRO	243	29.296	30.493	-8.769	1.00	53.76
ATOM	4648	CG	PRO	243	27.810	30.379	-8.871	1.00	53.31
ATOM	4649	CD	PRO	243	27.603	28.880	-8.795	1.00	52.08
ATOM	4650	N	LYS	244	30.756	30.433	-5.725	1.00	61.20
ATOM	4651	CA	LYS	244	30.921	31.092	-4.426	1.00	66.20
ATOM	4652	C	LYS	244	30.562	32.575	-4.582	1.00	68.75
ATOM	4653	O	LYS	244	31.279	33.321	-5.259	1.00	70.00
ATOM	4654	CB	LYS	244	32.380	30.974	-3.960	1.00	67.69
ATOM	4655	CG	LYS	244	33.058	29.617	-4.204	1.00	70.10
ATOM	4656	CD	LYS	244	34.397	29.772	-4.964	1.00	71.72
ATOM	4657	CE	LYS	244	35.415	30.651	-4.223	1.00	72.46
ATOM	4658	NZ	LYS	244	36.721	30.806	-4.949	1.00	72.45
ATOM	4659	H	LYS	244	31.548	30.127	-6.221	1.00	0.00
ATOM	4660	HZ1	LYS	244	36.637	31.243	-5.888	1.00	0.00
ATOM	4661	HZ2	LYS	244	37.243	29.903	-5.025	1.00	0.00
ATOM	4662	HZ3	LYS	244	37.357	31.394	-4.363	1.00	0.00
ATOM	4663	N	LYS	245	29.467	32.994	-3.948	1.00	69.97
ATOM	4664	CA	LYS	245	29.011	34.384	-4.038	1.00	70.61
ATOM	4665	C	LYS	245	29.942	35.366	-3.322	1.00	70.74
ATOM	4666	O	LYS	245	29.810	36.585	-3.474	1.00	70.46
ATOM	4667	CB	LYS	245	27.584	34.512	-3.493	1.00	70.94
ATOM	4668	CG	LYS	245	26.861	35.790	-3.889	1.00	70.89
ATOM	4669	CD	LYS	245	26.500	35.817	-5.376	1.00	70.82
ATOM	4670	CE	LYS	245	25.729	37.074	-5.730	1.00	70.84
ATOM	4671	NZ	LYS	245	26.554	38.297	-5.536	1.00	71.53
ATOM	4672	H	LYS	245	28.975	32.332	-3.428	1.00	0.00
ATOM	4673	HZ1	LYS	245	27.373	38.301	-6.193	1.00	0.00
ATOM	4674	HZ2	LYS	245	26.874	38.252	-4.541	1.00	0.00
ATOM	4675	HZ3	LYS	245	25.938	39.122	-5.691	1.00	0.00
TER	4676		LYS	245					
ATOM	4677	N	ILE	16	8.225	-15.885	-10.143	1.00	24.22
ATOM	4678	CA	ILE	16	8.964	-16.235	-11.350	1.00	23.21
ATOM	4679	C	ILE	16	8.225	-15.724	-12.582	1.00	22.76
ATOM	4680	O	ILE	16	7.140	-16.216	-12.928	1.00	23.91
ATOM	4681	CB	ILE	16	9.171	-17.776	-11.455	1.00	22.54
ATOM	4682	CG1	ILE	16	10.109	-18.264	-10.349	1.00	21.93
ATOM	4683	CG2	ILE	16	9.727	-18.157	-12.821	1.00	22.41
ATOM	4684	H	ILE	16	8.276	-16.450	-9.347	1.00	0.00
ATOM	4685	CD	ILE	16	11.533	-17.762	-10.478	1.00	22.32
ATOM	4686	N	VAL	17	8.818	-14.742	-13.248	1.00	21.78
ATOM	4687	CA	VAL	17	8.232	-14.165	-14.449	1.00	21.80
ATOM	4688	C	VAL	17	8.618	-15.026	-15.652	1.00	24.19
ATOM	4689	O	VAL	17	9.691	-15.640	-15.666	1.00	25.28
ATOM	4690	CB	VAL	17	8.742	-12.718	-14.680	1.00	20.14
ATOM	4691	CG1	VAL	17	8.123	-12.125	-15.931	1.00	18.23
ATOM	4692	CG2	VAL	17	8.436	-11.846	-13.472	1.00	19.55
ATOM	4693	H	VAL	17	9.705	-14.423	-12.992	1.00	0.00
ATOM	4694	N	GLY	18	7.693	-15.148	-16.603	1.00	25.93
ATOM	4695	CA	GLY	18	7.942	-15.902	-17.826	1.00	28.43
ATOM	4696	C	GLY	18	8.080	-17.416	-17.798	1.00	29.98
ATOM	4697	O	GLY	18	8.018	-18.059	-18.847	1.00	29.76
ATOM	4698	H	GLY	18	6.837	-14.694	-16.483	1.00	0.00
ATOM	4699	N	GLY	19	8.291	-17.998	-16.626	1.00	31.39
ATOM	4700	CA	GLY	19	8.430	-19.439	-16.564	1.00	33.60
ATOM	4701	C	GLY	19	7.126	-20.212	-16.645	1.00	35.04
ATOM	4702	O	GLY	19	6.054	-19.636	-16.874	1.00	34.94
ATOM	4703	H	GLY	19	8.438	-17.449	-15.833	1.00	0.00
ATOM	4704	N	GLN	20	7.219	-21.509	-16.363	1.00	35.65
ATOM	4705	CA	GLN	20	6.084	-22.423	-16.374	1.00	35.51

92/126

ATOM	4706	C	GLN	20	6.004	-23.154	-15.031	1.00	34.43
ATOM	4707	O	GLN	20	6.811	-22.909	-14.132	1.00	33.71
ATOM	4708	CB	GLN	20	6.226	-23.429	-17.520	1.00	37.81
ATOM	4709	CG	GLN	20	7.594	-24.097	-17.607	1.00	42.23
ATOM	4710	CD	GLN	20	7.596	-25.337	-18.492	1.00	44.42
ATOM	4711	OE1	GLN	20	6.542	-25.878	-18.829	1.00	45.77
ATOM	4712	NE2	GLN	20	8.790	-25.806	-18.854	1.00	45.05
ATOM	4713	H	GLN	20	8.098	-21.840	-16.081	1.00	0.00
ATOM	4714	HE21	GLN	20	9.605	-25.358	-18.559	1.00	0.00
ATOM	4715	HE22	GLN	20	8.754	-26.602	-19.425	1.00	0.00
ATOM	4716	N	GLU	21	5.023	-24.037	-14.893	1.00	34.17
ATOM	4717	CA	GLU	21	4.834	-24.797	-13.662	1.00	33.73
ATOM	4718	C	GLU	21	5.768	-25.990	-13.650	1.00	32.99
ATOM	4719	O	GLU	21	5.836	-26.748	-14.614	1.00	34.12
ATOM	4720	CB	GLU	21	3.388	-25.257	-13.557	1.00	36.71
ATOM	4721	CG	GLU	21	3.063	-25.984	-12.275	1.00	41.14
ATOM	4722	CD	GLU	21	1.571	-26.064	-12.004	1.00	42.78
ATOM	4723	OE1	GLU	21	0.816	-25.204	-12.524	1.00	42.83
ATOM	4724	OE2	GLU	21	1.161	-26.975	-11.243	1.00	44.63
ATOM	4725	H	GLU	21	4.417	-24.227	-15.635	1.00	0.00
ATOM	4726	N	ALA	22	6.499	-26.150	-12.560	1.00	32.41
ATOM	4727	CA	ALA	22	7.459	-27.235	-12.446	1.00	32.78
ATOM	4728	C	ALA	22	6.839	-28.588	-12.163	1.00	33.04
ATOM	4729	O	ALA	22	5.869	-28.696	-11.415	1.00	33.60
ATOM	4730	CB	ALA	22	8.492	-26.909	-11.385	1.00	33.32
ATOM	4731	H	ALA	22	6.345	-25.562	-11.804	1.00	0.00
ATOM	4732	N	PRO	23	7.397	-29.647	-12.769	1.00	33.44
ATOM	4733	CA	PRO	23	6.917	-31.016	-12.589	1.00	33.21
ATOM	4734	C	PRO	23	7.064	-31.410	-11.130	1.00	34.09
ATOM	4735	O	PRO	23	8.002	-30.979	-10.452	1.00	33.58
ATOM	4736	CB	PRO	23	7.861	-31.815	-13.481	1.00	33.05
ATOM	4737	CG	PRO	23	8.158	-30.850	-14.592	1.00	32.20
ATOM	4738	CD	PRO	23	8.432	-29.595	-13.816	1.00	33.28
ATOM	4739	N	ARG	24	6.177	-32.285	-10.670	1.00	35.57
ATOM	4740	CA	ARG	24	6.180	-32.728	-9.283	1.00	37.20
ATOM	4741	C	ARG	24	7.431	-33.486	-8.880	1.00	37.27
ATOM	4742	O	ARG	24	7.452	-34.117	-7.829	1.00	38.38
ATOM	4743	CB	ARG	24	4.948	-33.595	-8.994	1.00	40.15
ATOM	4744	CG	ARG	24	3.607	-32.921	-9.268	1.00	45.28
ATOM	4745	CD	ARG	24	2.432	-33.729	-8.696	1.00	49.71
ATOM	4746	NE	ARG	24	1.130	-33.108	-8.969	1.00	52.89
ATOM	4747	CZ	ARG	24	0.368	-32.500	-8.057	1.00	54.67
ATOM	4748	NH1	ARG	24	0.764	-32.421	-6.790	1.00	55.21
ATOM	4749	NH2	ARG	24	-0.785	-31.947	-8.422	1.00	54.77
ATOM	4750	H	ARG	24	5.511	-32.648	-11.287	1.00	0.00
ATOM	4751	HE	ARG	24	0.827	-33.176	-9.902	1.00	0.00
ATOM	4752	HH11	ARG	24	1.633	-32.843	-6.521	1.00	0.00
ATOM	4753	HH12	ARG	24	0.225	-31.979	-6.055	1.00	0.00
ATOM	4754	HH21	ARG	24	-1.097	-31.948	-9.375	1.00	0.00
ATOM	4755	HH22	ARG	24	-1.411	-31.473	-7.796	1.00	0.00
ATOM	4756	N	SER	25	8.481	-33.414	-9.683	1.00	37.57
ATOM	4757	CA	SER	25	9.704	-34.136	-9.367	1.00	39.11
ATOM	4758	C	SER	25	10.979	-33.303	-9.385	1.00	38.90
ATOM	4759	O	SER	25	11.880	-33.521	-8.575	1.00	40.61
ATOM	4760	CB	SER	25	9.841	-35.335	-10.306	1.00	40.68
ATOM	4761	OG	SER	25	9.230	-35.067	-11.563	1.00	42.48
ATOM	4762	H	SER	25	8.497	-32.924	-10.512	1.00	0.00
ATOM	4763	HG	SER	25	9.321	-35.861	-12.099	1.00	0.00
ATOM	4764	N	LYS	26	11.053	-32.346	-10.303	1.00	37.21
ATOM	4765	CA	LYS	26	12.227	-31.494	-10.423	1.00	35.38
ATOM	4766	C	LYS	26	12.398	-30.634	-9.183	1.00	34.27
ATOM	4767	O	LYS	26	11.489	-30.521	-8.365	1.00	33.98
ATOM	4768	CB	LYS	26	12.098	-30.584	-11.643	1.00	36.26

98/176

ATOM	4769	CG	LYS	26	12.068	-31.308	-12.978	1.00	38.84
ATOM	4770	CD	LYS	26	13.463	-31.638	-13.514	1.00	41.20
ATOM	4771	CE	LYS	26	14.149	-30.425	-14.158	1.00	42.09
ATOM	4772	NZ	LYS	26	13.359	-29.795	-15.274	1.00	42.78
ATOM	4773	H	LYS	26	10.275	-32.203	-10.876	1.00	0.00
ATOM	4774	HZ1	LYS	26	12.476	-29.375	-14.914	1.00	0.00
ATOM	4775	HZ2	LYS	26	13.117	-30.450	-16.042	1.00	0.00
ATOM	4776	HZ3	LYS	26	13.894	-29.002	-15.682	1.00	0.00
ATOM	4777	N	TRP	27	13.577	-30.035	-9.057	1.00	33.22
ATOM	4778	CA	TRP	27	13.916	-29.134	-7.952	1.00	30.99
ATOM	4779	C	TRP	27	13.588	-29.693	-6.576	1.00	30.71
ATOM	4780	O	TRP	27	12.874	-29.061	-5.801	1.00	30.06
ATOM	4781	CB	TRP	27	13.213	-27.780	-8.140	1.00	27.90
ATOM	4782	CG	TRP	27	12.976	-27.446	-9.571	1.00	24.07
ATOM	4783	CD1	TRP	27	11.782	-27.135	-10.148	1.00	23.26
ATOM	4784	CD2	TRP	27	13.943	-27.467	-10.628	1.00	22.90
ATOM	4785	NE1	TRP	27	11.944	-26.966	-11.501	1.00	23.64
ATOM	4786	CE2	TRP	27	13.260	-27.165	-11.822	1.00	22.99
ATOM	4787	CE3	TRP	27	15.320	-27.721	-10.682	1.00	22.99
ATOM	4788	CZ2	TRP	27	13.906	-27.108	-13.061	1.00	21.66
ATOM	4789	CZ3	TRP	27	15.965	-27.666	-11.919	1.00	21.66
ATOM	4790	CH2	TRP	27	15.254	-27.361	-13.088	1.00	20.70
ATOM	4791	H	TRP	27	14.257	-30.217	-9.734	1.00	0.00
ATOM	4792	HE1	TRP	27	11.251	-26.722	-12.150	1.00	0.00
ATOM	4793	N	PRO	28	14.138	-30.872	-6.242	1.00	31.61
ATOM	4794	CA	PRO	28	13.904	-31.524	-4.947	1.00	32.51
ATOM	4795	C	PRO	28	14.600	-30.841	-3.760	1.00	32.76
ATOM	4796	O	PRO	28	14.372	-31.203	-2.604	1.00	33.56
ATOM	4797	CB	PRO	28	14.453	-32.931	-5.181	1.00	32.50
ATOM	4798	CG	PRO	28	15.589	-32.685	-6.106	1.00	32.27
ATOM	4799	CD	PRO	28	14.994	-31.712	-7.099	1.00	32.31
ATOM	4800	N	TRP	29	15.460	-29.871	-4.059	1.00	32.19
ATOM	4801	CA	TRP	29	16.205	-29.129	-3.041	1.00	30.89
ATOM	4802	C	TRP	29	15.497	-27.841	-2.631	1.00	30.76
ATOM	4803	O	TRP	29	15.855	-27.228	-1.620	1.00	32.71
ATOM	4804	CB	TRP	29	17.610	-28.793	-3.561	1.00	30.53
ATOM	4805	CG	TRP	29	17.621	-28.387	-5.011	1.00	29.41
ATOM	4806	CD1	TRP	29	17.257	-27.176	-5.532	1.00	28.36
ATOM	4807	CD2	TRP	29	17.953	-29.219	-6.126	1.00	29.08
ATOM	4808	NE1	TRP	29	17.333	-27.207	-6.902	1.00	28.19
ATOM	4809	CE2	TRP	29	17.758	-28.450	-7.295	1.00	28.91
ATOM	4810	CE3	TRP	29	18.392	-30.543	-6.251	1.00	29.08
ATOM	4811	CZ2	TRP	29	17.988	-28.958	-8.575	1.00	29.45
ATOM	4812	CZ3	TRP	29	18.622	-31.050	-7.524	1.00	30.79
ATOM	4813	CH2	TRP	29	18.418	-30.255	-8.671	1.00	30.67
ATOM	4814	H	TRP	29	15.588	-29.644	-4.996	1.00	0.00
ATOM	4815	HE1	TRP	29	17.098	-26.447	-7.494	1.00	0.00
ATOM	4816	N	GLN	30	14.524	-27.420	-3.439	1.00	27.97
ATOM	4817	CA	GLN	30	13.762	-26.202	-3.188	1.00	25.07
ATOM	4818	C	GLN	30	13.204	-26.177	-1.765	1.00	24.67
ATOM	4819	O	GLN	30	12.725	-27.190	-1.257	1.00	25.19
ATOM	4820	CB	GLN	30	12.637	-26.073	-4.222	1.00	23.69
ATOM	4821	CG	GLN	30	11.840	-24.770	-4.164	1.00	22.42
ATOM	4822	CD	GLN	30	12.716	-23.531	-4.261	1.00	21.52
ATOM	4823	OE1	GLN	30	13.029	-22.909	-3.253	1.00	21.27
ATOM	4824	NE2	GLN	30	13.121	-23.176	-5.471	1.00	19.76
ATOM	4825	H	GLN	30	14.275	-27.960	-4.211	1.00	0.00
ATOM	4826	HE21	GLN	30	12.895	-23.724	-6.248	1.00	0.00
ATOM	4827	HE22	GLN	30	13.628	-22.335	-5.510	1.00	0.00
ATOM	4828	N	VAL	31	13.307	-25.021	-1.119	1.00	23.83
ATOM	4829	CA	VAL	31	12.825	-24.827	0.242	1.00	22.84
ATOM	4830	C	VAL	31	12.104	-23.471	0.308	1.00	23.43
ATOM	4831	O	VAL	31	12.461	-22.534	-0.411	1.00	23.85

ATOM	4832	CB	VAL	31	13.999	-24.875	1.242	1.00	22.05
ATOM	4833	CG1	VAL	31	13.555	-24.432	2.614	1.00	21.32
ATOM	4834	CG2	VAL	31	14.561	-26.281	1.312	1.00	23.52
ATOM	4835	H	VAL	31	13.690	-24.239	-1.572	1.00	0.00
ATOM	4836	N	SER	32	11.068	-23.388	1.140	1.00	21.70
ATOM	4837	CA	SER	32	10.279	-22.173	1.299	1.00	20.80
ATOM	4838	C	SER	32	10.300	-21.737	2.751	1.00	21.90
ATOM	4839	O	SER	32	9.780	-22.447	3.610	1.00	25.44
ATOM	4840	CB	SER	32	8.831	-22.446	0.870	1.00	21.01
ATOM	4841	OG	SER	32	7.887	-21.672	1.608	1.00	19.78
ATOM	4842	H	SER	32	10.828	-24.182	1.670	1.00	0.00
ATOM	4843	HG	SER	32	8.016	-21.955	2.527	1.00	0.00
ATOM	4844	N	LEU	33	10.826	-20.551	3.026	1.00	20.08
ATOM	4845	CA	LEU	33	10.889	-20.061	4.399	1.00	19.46
ATOM	4846	C	LEU	33	9.567	-19.421	4.828	1.00	19.50
ATOM	4847	O	LEU	33	8.954	-18.686	4.055	1.00	20.66
ATOM	4848	CB	LEU	33	12.048	-19.081	4.531	1.00	18.95
ATOM	4849	CG	LEU	33	13.318	-19.629	3.879	1.00	20.22
ATOM	4850	CD1	LEU	33	14.491	-18.709	4.167	1.00	21.54
ATOM	4851	CD2	LEU	33	13.608	-21.032	4.389	1.00	20.20
ATOM	4852	H	LEU	33	11.146	-19.972	2.315	1.00	0.00
ATOM	4853	N	ARG	34	9.134	-19.685	6.058	1.00	19.28
ATOM	4854	CA	ARG	34	7.869	-19.142	6.551	1.00	21.31
ATOM	4855	C	ARG	34	8.039	-18.293	7.795	1.00	23.91
ATOM	4856	O	ARG	34	8.793	-18.659	8.691	1.00	24.88
ATOM	4857	CB	ARG	34	6.904	-20.268	6.916	1.00	21.38
ATOM	4858	CG	ARG	34	6.746	-21.342	5.882	1.00	21.02
ATOM	4859	CD	ARG	34	6.059	-20.835	4.640	1.00	21.30
ATOM	4860	NE	ARG	34	5.736	-21.970	3.791	1.00	22.30
ATOM	4861	CZ	ARG	34	4.626	-22.698	3.897	1.00	21.20
ATOM	4862	NH1	ARG	34	3.700	-22.401	4.801	1.00	19.12
ATOM	4863	NH2	ARG	34	4.467	-23.764	3.131	1.00	21.55
ATOM	4864	H	ARG	34	9.694	-20.229	6.655	1.00	0.00
ATOM	4865	HE	ARG	34	6.370	-22.181	3.083	1.00	0.00
ATOM	4866	HH11	ARG	34	3.743	-21.598	5.401	1.00	0.00
ATOM	4867	HH12	ARG	34	2.897	-23.020	4.875	1.00	0.00
ATOM	4868	HH21	ARG	34	5.049	-24.171	2.420	1.00	0.00
ATOM	4869	HH22	ARG	34	3.625	-24.334	3.190	1.00	0.00
ATOM	4870	N	VAL	35	7.310	-17.181	7.859	1.00	25.82
ATOM	4871	CA	VAL	35	7.336	-16.288	9.020	1.00	27.27
ATOM	4872	C	VAL	35	6.007	-16.426	9.727	1.00	29.38
ATOM	4873	O	VAL	35	4.959	-16.507	9.083	1.00	29.92
ATOM	4874	CB	VAL	35	7.486	-14.794	8.650	1.00	27.28
ATOM	4875	CG1	VAL	35	8.923	-14.462	8.323	1.00	28.36
ATOM	4876	CG2	VAL	35	6.557	-14.427	7.507	1.00	27.09
ATOM	4877	H	VAL	35	6.722	-17.008	7.093	1.00	0.00
ATOM	4878	N	HIS	36	6.033	-16.445	11.049	1.00	31.91
ATOM	4879	CA	HIS	36	4.798	-16.575	11.777	1.00	35.58
ATOM	4880	C	HIS	36	3.970	-15.310	11.703	1.00	37.68
ATOM	4881	O	HIS	36	4.236	-14.341	12.413	1.00	39.26
ATOM	4882	CB	HIS	36	5.027	-16.946	13.234	1.00	38.28
ATOM	4883	CG	HIS	36	3.760	-17.262	13.962	1.00	42.80
ATOM	4884	ND1	HIS	36	3.423	-16.679	15.165	1.00	44.52
ATOM	4885	CD2	HIS	36	2.718	-18.062	13.625	1.00	44.67
ATOM	4886	CE1	HIS	36	2.227	-17.101	15.536	1.00	46.69
ATOM	4887	NE2	HIS	36	1.777	-17.941	14.619	1.00	46.59
ATOM	4888	H	HIS	36	6.879	-16.425	11.532	1.00	0.00
ATOM	4889	HD1	HIS	36	3.981	-16.042	15.661	1.00	0.00
ATOM	4890	HE2	HIS	36	0.902	-18.390	14.626	1.00	0.00
ATOM	4891	N	GLY	37	2.994	-15.315	10.804	1.00	38.63
ATOM	4892	CA	GLY	37	2.099	-14.185	10.664	1.00	37.93
ATOM	4893	C	GLY	37	0.806	-14.581	11.349	1.00	37.70
ATOM	4894	O	GLY	37	0.831	-15.321	12.340	1.00	37.76

100/176

ATOM	4895	H	GLY	37	2.868	-16.076	10.207	1.00	0.00
ATOM	4896	N	PRO	37A	-0.350	-14.170	10.807	1.00	37.55
ATOM	4897	CA	PRO	37A	-1.611	-14.841	11.143	1.00	36.43
ATOM	4898	C	PRO	37A	-1.496	-16.338	10.841	1.00	35.22
ATOM	4899	O	PRO	37A	-2.045	-17.174	11.561	1.00	36.74
ATOM	4900	CB	PRO	37A	-2.623	-14.133	10.244	1.00	37.27
ATOM	4901	CG	PRO	37A	-1.793	-13.661	9.075	1.00	37.76
ATOM	4902	CD	PRO	37A	-0.542	-13.174	9.740	1.00	37.95
ATOM	4903	N	TYR	37B	-0.751	-16.654	9.785	1.00	31.47
ATOM	4904	CA	TYR	37B	-0.494	-18.025	9.380	1.00	27.72
ATOM	4905	C	TYR	37B	0.992	-18.108	9.001	1.00	27.24
ATOM	4906	O	TYR	37B	1.722	-17.129	9.146	1.00	27.56
ATOM	4907	CB	TYR	37B	-1.406	-18.425	8.222	1.00	24.95
ATOM	4908	CG	TYR	37B	-1.240	-17.610	6.964	1.00	22.80
ATOM	4909	CD1	TYR	37B	-0.476	-18.085	5.905	1.00	21.95
ATOM	4910	CD2	TYR	37B	-1.852	-16.372	6.825	1.00	21.38
ATOM	4911	CE1	TYR	37B	-0.321	-17.350	4.742	1.00	20.09
ATOM	4912	CE2	TYR	37B	-1.704	-15.628	5.662	1.00	20.24
ATOM	4913	CZ	TYR	37B	-0.932	-16.124	4.627	1.00	20.15
ATOM	4914	OH	TYR	37B	-0.728	-15.384	3.485	1.00	23.27
ATOM	4915	H	TYR	37B	-0.328	-15.952	9.256	1.00	0.00
ATOM	4916	HH	TYR	37B	-1.119	-14.500	3.605	1.00	0.00
ATOM	4917	N	TRP	38	1.453	-19.264	8.538	1.00	26.42
ATOM	4918	CA	TRP	38	2.861	-19.411	8.173	1.00	25.32
ATOM	4919	C	TRP	38	3.143	-19.032	6.728	1.00	23.23
ATOM	4920	O	TRP	38	3.308	-19.878	5.848	1.00	22.13
ATOM	4921	CB	TRP	38	3.345	-20.816	8.511	1.00	26.75
ATOM	4922	CG	TRP	38	3.396	-21.004	9.984	1.00	27.78
ATOM	4923	CD1	TRP	38	2.393	-21.462	10.790	1.00	28.33
ATOM	4924	CD2	TRP	38	4.472	-20.641	10.846	1.00	28.34
ATOM	4925	NE1	TRP	38	2.778	-21.395	12.104	1.00	28.40
ATOM	4926	CE2	TRP	38	4.051	-20.894	12.167	1.00	28.81
ATOM	4927	CE3	TRP	38	5.756	-20.121	10.631	1.00	28.65
ATOM	4928	CZ2	TRP	38	4.869	-20.643	13.273	1.00	29.76
ATOM	4929	CZ3	TRP	38	6.567	-19.873	11.729	1.00	28.85
ATOM	4930	CH2	TRP	38	6.121	-20.136	13.034	1.00	29.64
ATOM	4931	H	TRP	38	0.849	-20.023	8.414	1.00	0.00
ATOM	4932	HE1	TRP	38	2.238	-21.713	12.858	1.00	0.00
ATOM	4933	N	MET	39	3.271	-17.730	6.534	1.00	22.72
ATOM	4934	CA	MET	39	3.490	-17.119	5.239	1.00	23.27
ATOM	4935	C	MET	39	4.864	-17.339	4.635	1.00	23.29
ATOM	4936	O	MET	39	5.882	-17.268	5.328	1.00	24.37
ATOM	4937	CB	MET	39	3.240	-15.625	5.365	1.00	25.23
ATOM	4938	CG	MET	39	2.782	-14.948	4.100	1.00	29.13
ATOM	4939	SD	MET	39	2.625	-13.194	4.415	1.00	33.26
ATOM	4940	CE	MET	39	1.762	-13.226	6.043	1.00	32.18
ATOM	4941	H	MET	39	3.279	-17.157	7.333	1.00	0.00
ATOM	4942	N	HIS	40	4.884	-17.599	3.332	1.00	21.34
ATOM	4943	CA	HIS	40	6.123	-17.797	2.611	1.00	19.47
ATOM	4944	C	HIS	40	6.668	-16.419	2.300	1.00	19.04
ATOM	4945	O	HIS	40	5.957	-15.608	1.714	1.00	20.30
ATOM	4946	CB	HIS	40	5.849	-18.523	1.299	1.00	18.77
ATOM	4947	CG	HIS	40	6.974	-18.438	0.314	1.00	19.07
ATOM	4948	ND1	HIS	40	7.985	-19.370	0.257	1.00	19.43
ATOM	4949	CD2	HIS	40	7.250	-17.528	-0.651	1.00	19.15
ATOM	4950	CE1	HIS	40	8.836	-19.041	-0.698	1.00	19.74
ATOM	4951	NE2	HIS	40	8.414	-17.926	-1.263	1.00	20.45
ATOM	4952	H	HIS	40	4.066	-17.639	2.808	1.00	0.00
ATOM	4953	HD1	HIS	40	8.040	-20.145	0.819	1.00	0.00
ATOM	4954	HE2	HIS	40	8.911	-17.400	-1.939	1.00	0.00
ATOM	4955	N	PHE	41	7.914	-16.149	2.671	1.00	18.16
ATOM	4956	CA	PHE	41	8.509	-14.845	2.372	1.00	17.95
ATOM	4957	C	PHE	41	9.726	-14.898	1.428	1.00	17.52

101/176

ATOM	4958	O	PHE	41	9.977	-13.966	0.667	1.00	16.15
ATOM	4959	CB	PHE	41	8.816	-14.068	3.660	1.00	18.97
ATOM	4960	CG	PHE	41	9.829	-14.726	4.569	1.00	20.64
ATOM	4961	CD1	PHE	41	11.115	-14.204	4.688	1.00	21.34
ATOM	4962	CD2	PHE	41	9.487	-15.823	5.345	1.00	21.60
ATOM	4963	CE1	PHE	41	12.039	-14.760	5.568	1.00	20.46
ATOM	4964	CE2	PHE	41	10.409	-16.383	6.229	1.00	22.18
ATOM	4965	CZ	PHE	41	11.685	-15.848	6.339	1.00	21.73
ATOM	4966	H	PHE	41	8.388	-16.849	3.171	1.00	0.00
ATOM	4967	N	CYS	42	10.432	-16.026	1.436	1.00	17.99
ATOM	4968	CA	CYS	42	11.607	-16.238	0.597	1.00	16.33
ATOM	4969	C	CYS	42	11.792	-17.723	0.372	1.00	16.40
ATOM	4970	O	CYS	42	11.264	-18.552	1.117	1.00	16.06
ATOM	4971	CB	CYS	42	12.865	-15.741	1.293	1.00	16.32
ATOM	4972	SG	CYS	42	13.254	-13.975	1.173	1.00	18.40
ATOM	4973	H	CYS	42	10.180	-16.756	2.032	1.00	0.00
ATOM	4974	N	GLY	43	12.558	-18.054	-0.655	1.00	18.04
ATOM	4975	CA	GLY	43	12.845	-19.442	-0.951	1.00	19.40
ATOM	4976	C	GLY	43	14.209	-19.797	-0.374	1.00	20.79
ATOM	4977	O	GLY	43	14.803	-19.009	0.376	1.00	21.76
ATOM	4978	H	GLY	43	13.017	-17.350	-1.154	1.00	0.00
ATOM	4979	N	GLY	44	14.708	-20.978	-0.725	1.00	20.11
ATOM	4980	CA	GLY	44	16.001	-21.422	-0.242	1.00	18.88
ATOM	4981	C	GLY	44	16.275	-22.778	-0.845	1.00	19.33
ATOM	4982	O	GLY	44	15.403	-23.354	-1.492	1.00	19.77
ATOM	4983	H	GLY	44	14.188	-21.585	-1.300	1.00	0.00
ATOM	4984	N	SER	45	17.482	-23.290	-0.653	1.00	19.85
ATOM	4985	CA	SER	45	17.832	-24.591	-1.195	1.00	19.71
ATOM	4986	C	SER	45	18.570	-25.467	-0.190	1.00	20.39
ATOM	4987	O	SER	45	19.430	-24.991	0.564	1.00	20.55
ATOM	4988	CB	SER	45	18.656	-24.425	-2.473	1.00	20.24
ATOM	4989	OG	SER	45	19.764	-23.567	-2.274	1.00	21.39
ATOM	4990	H	SER	45	18.162	-22.773	-0.174	1.00	0.00
ATOM	4991	HG	SER	45	19.497	-22.652	-2.116	1.00	0.00
ATOM	4992	N	LEU	46	18.185	-26.738	-0.151	1.00	21.01
ATOM	4993	CA	LEU	46	18.787	-27.714	0.750	1.00	21.40
ATOM	4994	C	LEU	46	20.149	-28.092	0.185	1.00	22.72
ATOM	4995	O	LEU	46	20.226	-28.620	-0.920	1.00	23.71
ATOM	4996	CB	LEU	46	17.897	-28.956	0.819	1.00	19.98
ATOM	4997	CG	LEU	46	17.832	-29.763	2.119	1.00	19.29
ATOM	4998	CD1	LEU	46	17.160	-28.939	3.210	1.00	17.03
ATOM	4999	CD2	LEU	46	17.051	-31.052	1.877	1.00	18.13
ATOM	5000	H	LEU	46	17.445	-27.020	-0.719	1.00	0.00
ATOM	5001	N	ILE	47	21.224	-27.780	0.903	1.00	23.99
ATOM	5002	CA	ILE	47	22.570	-28.121	0.428	1.00	26.57
ATOM	5003	C	ILE	47	23.197	-29.207	1.298	1.00	28.97
ATOM	5004	O	ILE	47	24.268	-29.746	0.990	1.00	28.62
ATOM	5005	CB	ILE	47	23.525	-26.893	0.402	1.00	26.31
ATOM	5006	CG1	ILE	47	23.666	-26.277	1.801	1.00	25.50
ATOM	5007	CG2	ILE	47	23.049	-25.878	-0.621	1.00	26.74
ATOM	5008	H	ILE	47	21.125	-27.356	1.786	1.00	0.00
ATOM	5009	CD	ILE	47	24.813	-25.290	1.931	1.00	22.85
ATOM	5010	N	HIS	48	22.506	-29.528	2.385	1.00	31.56
ATOM	5011	CA	HIS	48	22.955	-30.528	3.338	1.00	33.58
ATOM	5012	C	HIS	48	21.701	-30.909	4.121	1.00	33.17
ATOM	5013	O	HIS	48	20.921	-30.036	4.485	1.00	31.83
ATOM	5014	CB	HIS	48	23.988	-29.891	4.267	1.00	36.59
ATOM	5015	CG	HIS	48	24.811	-30.879	5.027	1.00	39.47
ATOM	5016	ND1	HIS	48	25.914	-31.499	4.481	1.00	41.12
ATOM	5017	CD2	HIS	48	24.705	-31.342	6.295	1.00	40.60
ATOM	5018	CE1	HIS	48	26.453	-32.303	5.379	1.00	42.20
ATOM	5019	NE2	HIS	48	25.738	-32.226	6.488	1.00	42.97
ATOM	5020	H	HIS	48	21.670	-29.050	2.589	1.00	0.00

102/96

ATOM	5021	HD1	HIS	48	26.251	-31.355	3.561	1.00	0.00
ATOM	5022	HE2	HIS	48	25.904	-32.699	7.334	1.00	0.00
ATOM	5023	N	PRO	49	21.513	-32.206	4.432	1.00	34.13
ATOM	5024	CA	PRO	49	20.324	-32.637	5.177	1.00	34.18
ATOM	5025	C	PRO	49	20.021	-31.832	6.439	1.00	34.75
ATOM	5026	O	PRO	49	18.956	-31.986	7.026	1.00	35.84
ATOM	5027	CB	PRO	49	20.640	-34.094	5.504	1.00	32.88
ATOM	5028	CG	PRO	49	21.427	-34.525	4.323	1.00	33.47
ATOM	5029	CD	PRO	49	22.375	-33.363	4.133	1.00	34.53
ATOM	5030	N	GLN	50	20.934	-30.961	6.849	1.00	33.89
ATOM	5031	CA	GLN	50	20.703	-30.175	8.044	1.00	34.31
ATOM	5032	C	GLN	50	20.960	-28.690	7.822	1.00	33.32
ATOM	5033	O	GLN	50	20.608	-27.862	8.659	1.00	33.87
ATOM	5034	CB	GLN	50	21.583	-30.707	9.170	1.00	35.88
ATOM	5035	CG	GLN	50	21.173	-30.262	10.558	1.00	37.87
ATOM	5036	CD	GLN	50	21.970	-30.967	11.631	1.00	39.08
ATOM	5037	OE1	GLN	50	22.332	-32.133	11.478	1.00	40.92
ATOM	5038	NE2	GLN	50	22.255	-30.268	12.718	1.00	40.07
ATOM	5039	H	GLN	50	21.765	-30.828	6.377	1.00	0.00
ATOM	5040	HE21	GLN	50	21.911	-29.345	12.764	1.00	0.00
ATOM	5041	HE22	GLN	50	22.794	-30.682	13.415	1.00	0.00
ATOM	5042	N	TRP	51	21.516	-28.349	6.668	1.00	31.53
ATOM	5043	CA	TRP	51	21.824	-26.960	6.358	1.00	30.74
ATOM	5044	C	TRP	51	21.097	-26.438	5.127	1.00	29.66
ATOM	5045	O	TRP	51	21.157	-27.048	4.053	1.00	30.66
ATOM	5046	CB	TRP	51	23.329	-26.793	6.168	1.00	31.96
ATOM	5047	CG	TRP	51	24.098	-26.805	7.441	1.00	32.01
ATOM	5048	CD1	TRP	51	24.779	-27.852	7.978	1.00	32.16
ATOM	5049	CD2	TRP	51	24.289	-25.699	8.330	1.00	31.96
ATOM	5050	NE1	TRP	51	25.387	-27.468	9.149	1.00	32.37
ATOM	5051	CE2	TRP	51	25.103	-26.152	9.387	1.00	31.28
ATOM	5052	CE3	TRP	51	23.853	-24.367	8.330	1.00	32.30
ATOM	5053	CZ2	TRP	51	25.490	-25.326	10.437	1.00	31.36
ATOM	5054	CZ3	TRP	51	24.238	-23.544	9.373	1.00	32.56
ATOM	5055	CH2	TRP	51	25.051	-24.030	10.414	1.00	32.51
ATOM	5056	H	TRP	51	21.641	-28.999	5.962	1.00	0.00
ATOM	5057	HE1	TRP	51	25.936	-28.019	9.748	1.00	0.00
ATOM	5058	N	VAL	52	20.437	-25.294	5.279	1.00	27.31
ATOM	5059	CA	VAL	52	19.700	-24.669	4.186	1.00	25.46
ATOM	5060	C	VAL	52	20.420	-23.399	3.747	1.00	24.59
ATOM	5061	O	VAL	52	20.700	-22.533	4.579	1.00	24.74
ATOM	5062	CB	VAL	52	18.281	-24.286	4.633	1.00	24.86
ATOM	5063	CG1	VAL	52	17.455	-23.866	3.443	1.00	25.37
ATOM	5064	CG2	VAL	52	17.626	-25.442	5.353	1.00	24.74
ATOM	5065	H	VAL	52	20.428	-24.868	6.157	1.00	0.00
ATOM	5066	N	LEU	53	20.729	-23.290	2.455	1.00	22.32
ATOM	5067	CA	LEU	53	21.413	-22.104	1.934	1.00	20.18
ATOM	5068	C	LEU	53	20.380	-21.128	1.401	1.00	20.59
ATOM	5069	O	LEU	53	19.510	-21.512	0.617	1.00	21.77
ATOM	5070	CB	LEU	53	22.377	-22.473	0.809	1.00	18.16
ATOM	5071	CG	LEU	53	23.123	-21.283	0.191	1.00	16.72
ATOM	5072	CD1	LEU	53	24.193	-20.778	1.146	1.00	14.83
ATOM	5073	CD2	LEU	53	23.739	-21.675	-1.142	1.00	15.10
ATOM	5074	H	LEU	53	20.446	-23.975	1.817	1.00	0.00
ATOM	5075	N	THR	54	20.485	-19.870	1.812	1.00	20.55
ATOM	5076	CA	THR	54	19.550	-18.837	1.372	1.00	20.01
ATOM	5077	C	THR	54	20.231	-17.477	1.358	1.00	19.39
ATOM	5078	O	THR	54	21.412	-17.362	1.691	1.00	20.39
ATOM	5079	CB	THR	54	18.307	-18.776	2.289	1.00	20.29
ATOM	5080	OG1	THR	54	17.451	-17.708	1.876	1.00	21.02
ATOM	5081	CG2	THR	54	18.713	-18.554	3.726	1.00	20.72
ATOM	5082	H	THR	54	21.209	-19.604	2.421	1.00	0.00
ATOM	5083	HG1	THR	54	16.839	-17.495	2.587	1.00	0.00

103/176

ATOM	5084	N	ALA	55	19.490	-16.449	0.962	1.00	17.67
ATOM	5085	CA	ALA	55	20.025	-15.098	0.905	1.00	17.14
ATOM	5086	C	ALA	55	19.979	-14.423	2.271	1.00	17.54
ATOM	5087	O	ALA	55	19.022	-14.586	3.021	1.00	18.30
ATOM	5088	CB	ALA	55	19.265	-14.277	-0.114	1.00	16.70
ATOM	5089	H	ALA	55	18.553	-16.631	0.734	1.00	0.00
ATOM	5090	N	ALA	56	20.988	-13.609	2.556	1.00	17.90
ATOM	5091	CA	ALA	56	21.090	-12.907	3.826	1.00	16.90
ATOM	5092	C	ALA	56	19.990	-11.878	4.032	1.00	16.35
ATOM	5093	O	ALA	56	19.515	-11.697	5.150	1.00	17.82
ATOM	5094	CB	ALA	56	22.453	-12.244	3.946	1.00	17.02
ATOM	5095	H	ALA	56	21.649	-13.417	1.856	1.00	0.00
ATOM	5096	N	HIS	57	19.552	-11.228	2.958	1.00	15.40
ATOM	5097	CA	HIS	57	18.508	-10.207	3.080	1.00	15.38
ATOM	5098	C	HIS	57	17.139	-10.718	3.516	1.00	16.28
ATOM	5099	O	HIS	57	16.265	-9.932	3.877	1.00	15.88
ATOM	5100	CB	HIS	57	18.392	-9.362	1.805	1.00	13.79
ATOM	5101	CG	HIS	57	17.631	-10.011	0.689	1.00	10.94
ATOM	5102	ND1	HIS	57	18.236	-10.794	-0.268	1.00	11.07
ATOM	5103	CD2	HIS	57	16.333	-9.908	0.319	1.00	10.95
ATOM	5104	CE1	HIS	57	17.350	-11.139	-1.183	1.00	11.32
ATOM	5105	NE2	HIS	57	16.186	-10.613	-0.850	1.00	10.68
ATOM	5106	H	HIS	57	19.975	-11.445	2.104	1.00	0.00
ATOM	5107	HD1	HIS	57	19.191	-11.020	-0.331	1.00	0.00
ATOM	5108	HE2	HIS	57	15.396	-10.722	-1.431	1.00	0.00
ATOM	5109	N	CYS	58	16.946	-12.029	3.458	1.00	17.59
ATOM	5110	CA	CYS	58	15.690	-12.622	3.875	1.00	18.87
ATOM	5111	C	CYS	58	15.665	-12.779	5.396	1.00	21.54
ATOM	5112	O	CYS	58	14.600	-12.801	6.008	1.00	23.63
ATOM	5113	CB	CYS	58	15.503	-13.991	3.218	1.00	17.28
ATOM	5114	SG	CYS	58	15.275	-13.954	1.410	1.00	19.05
ATOM	5115	H	CYS	58	17.642	-12.648	3.148	1.00	0.00
ATOM	5116	N	VAL	59	16.840	-12.832	6.014	1.00	22.88
ATOM	5117	CA	VAL	59	16.918	-13.031	7.455	1.00	23.96
ATOM	5118	C	VAL	59	17.836	-12.053	8.176	1.00	25.02
ATOM	5119	O	VAL	59	18.079	-12.203	9.372	1.00	25.80
ATOM	5120	CB	VAL	59	17.372	-14.480	7.777	1.00	24.67
ATOM	5121	CG1	VAL	59	16.343	-15.484	7.249	1.00	25.58
ATOM	5122	CG2	VAL	59	18.736	-14.769	7.149	1.00	23.78
ATOM	5123	H	VAL	59	17.679	-12.705	5.530	1.00	0.00
ATOM	5124	N	GLY	60	18.324	-11.046	7.456	1.00	25.55
ATOM	5125	CA	GLY	60	19.216	-10.063	8.045	1.00	26.64
ATOM	5126	C	GLY	60	18.886	-8.661	7.564	1.00	28.79
ATOM	5127	O	GLY	60	17.790	-8.437	7.049	1.00	30.03
ATOM	5128	H	GLY	60	18.089	-10.937	6.513	1.00	0.00
ATOM	5129	N	PRO	60A	19.781	-7.679	7.752	1.00	29.70
ATOM	5130	CA	PRO	60A	20.906	-7.702	8.692	1.00	30.78
ATOM	5131	C	PRO	60A	20.448	-7.803	10.146	1.00	31.94
ATOM	5132	O	PRO	60A	21.149	-8.371	10.980	1.00	31.27
ATOM	5133	CB	PRO	60A	21.597	-6.368	8.419	1.00	31.02
ATOM	5134	CG	PRO	60A	20.457	-5.477	8.005	1.00	30.15
ATOM	5135	CD	PRO	60A	19.702	-6.374	7.068	1.00	29.37
ATOM	5136	N	ASP	60B	19.266	-7.259	10.429	1.00	33.82
ATOM	5137	CA	ASP	60B	18.677	-7.269	11.767	1.00	35.60
ATOM	5138	C	ASP	60B	18.375	-8.677	12.248	1.00	36.50
ATOM	5139	O	ASP	60B	17.718	-9.451	11.548	1.00	37.01
ATOM	5140	CB	ASP	60B	17.390	-6.444	11.788	1.00	38.15
ATOM	5141	CG	ASP	60B	17.647	-4.941	11.698	1.00	42.49
ATOM	5142	OD1	ASP	60B	18.487	-4.412	12.469	1.00	42.50
ATOM	5143	OD2	ASP	60B	16.989	-4.287	10.860	1.00	43.59
ATOM	5144	H	ASP	60B	18.768	-6.801	9.725	1.00	0.00
ATOM	5145	N	VAL	60C	18.779	-8.962	13.482	1.00	36.35
ATOM	5146	CA	VAL	60C	18.606	-10.268	14.110	1.00	36.24

104/176

ATOM	5147	C	VAL	60C	17.163	-10.771	14.204	1.00	36.10
ATOM	5148	O	VAL	60C	16.315	-10.142	14.830	1.00	35.49
ATOM	5149	CB	VAL	60C	19.249	-10.265	15.510	1.00	36.43
ATOM	5150	CG1	VAL	60C	18.927	-11.541	16.251	1.00	38.97
ATOM	5151	CG2	VAL	60C	20.751	-10.109	15.382	1.00	37.33
ATOM	5152	H	VAL	60C	19.161	-8.224	14.005	1.00	0.00
ATOM	5153	N	LYS	60D	16.907	-11.928	13.597	1.00	36.82
ATOM	5154	CA	LYS	60D	15.583	-12.547	13.600	1.00	37.98
ATOM	5155	C	LYS	60D	15.492	-13.630	14.674	1.00	39.53
ATOM	5156	O	LYS	60D	16.514	-14.095	15.187	1.00	40.12
ATOM	5157	CB	LYS	60D	15.264	-13.158	12.224	1.00	37.38
ATOM	5158	CG	LYS	60D	14.513	-12.232	11.252	1.00	37.34
ATOM	5159	CD	LYS	60D	15.332	-11.006	10.888	1.00	37.20
ATOM	5160	CE	LYS	60D	14.470	-9.875	10.356	1.00	36.94
ATOM	5161	NZ	LYS	60D	15.192	-8.575	10.495	1.00	38.18
ATOM	5162	H	LYS	60D	17.656	-12.419	13.202	1.00	0.00
ATOM	5163	HZ1	LYS	60D	16.099	-8.642	9.991	1.00	0.00
ATOM	5164	HZ2	LYS	60D	15.451	-8.402	11.490	1.00	0.00
ATOM	5165	HZ3	LYS	60D	14.662	-7.755	10.144	1.00	0.00
ATOM	5166	N	ASP	60E	14.262	-14.034	14.995	1.00	40.16
ATOM	5167	CA	ASP	60E	13.996	-15.066	15.998	1.00	39.82
ATOM	5168	C	ASP	60E	13.752	-16.418	15.323	1.00	38.83
ATOM	5169	O	ASP	60E	12.885	-16.547	14.455	1.00	39.83
ATOM	5170	CB	ASP	60E	12.777	-14.663	16.840	1.00	42.52
ATOM	5171	CG	ASP	60E	12.435	-15.677	17.934	1.00	44.36
ATOM	5172	OD1	ASP	60E	13.213	-16.625	18.170	1.00	45.50
ATOM	5173	OD2	ASP	60E	11.365	-15.522	18.560	1.00	45.23
ATOM	5174	H	ASP	60E	13.490	-13.645	14.547	1.00	0.00
ATOM	5175	N	LEU	61	14.484	-17.433	15.767	1.00	37.11
ATOM	5176	CA	LEU	61	14.385	-18.788	15.220	1.00	35.29
ATOM	5177	C	LEU	61	13.000	-19.400	15.426	1.00	34.96
ATOM	5178	O	LEU	61	12.592	-20.325	14.710	1.00	35.26
ATOM	5179	CB	LEU	61	15.445	-19.682	15.868	1.00	33.68
ATOM	5180	CG	LEU	61	16.919	-19.502	15.480	1.00	33.75
ATOM	5181	CD1	LEU	61	17.316	-18.042	15.419	1.00	33.54
ATOM	5182	CD2	LEU	61	17.793	-20.242	16.476	1.00	33.77
ATOM	5183	H	LEU	61	15.064	-17.243	16.534	1.00	0.00
ATOM	5184	N	ALA	62	12.296	-18.897	16.430	1.00	34.71
ATOM	5185	CA	ALA	62	10.963	-19.379	16.754	1.00	34.52
ATOM	5186	C	ALA	62	9.939	-18.718	15.857	1.00	34.16
ATOM	5187	O	ALA	62	8.902	-19.306	15.551	1.00	34.57
ATOM	5188	CB	ALA	62	10.644	-19.094	18.210	1.00	34.49
ATOM	5189	H	ALA	62	12.676	-18.174	16.981	1.00	0.00
ATOM	5190	N	ALA	63	10.231	-17.490	15.446	1.00	33.78
ATOM	5191	CA	ALA	63	9.330	-16.733	14.585	1.00	33.07
ATOM	5192	C	ALA	63	9.252	-17.318	13.187	1.00	32.15
ATOM	5193	O	ALA	63	8.221	-17.199	12.529	1.00	32.57
ATOM	5194	CB	ALA	63	9.760	-15.271	14.512	1.00	32.59
ATOM	5195	H	ALA	63	11.060	-17.066	15.757	1.00	0.00
ATOM	5196	N	LEU	64	10.341	-17.929	12.732	1.00	30.91
ATOM	5197	CA	LEU	64	10.367	-18.505	11.398	1.00	29.63
ATOM	5198	C	LEU	64	10.468	-20.021	11.384	1.00	29.35
ATOM	5199	O	LEU	64	10.890	-20.643	12.363	1.00	29.99
ATOM	5200	CB	LEU	64	11.485	-17.872	10.569	1.00	30.00
ATOM	5201	CG	LEU	64	12.940	-18.239	10.835	1.00	29.99
ATOM	5202	CD1	LEU	64	13.394	-19.193	9.748	1.00	31.32
ATOM	5203	CD2	LEU	64	13.808	-16.991	10.814	1.00	29.95
ATOM	5204	H	LEU	64	11.133	-17.978	13.300	1.00	0.00
ATOM	5205	N	ARG	65	10.090	-20.604	10.253	1.00	29.27
ATOM	5206	CA	ARG	65	10.099	-22.049	10.061	1.00	28.65
ATOM	5207	C	ARG	65	10.597	-22.362	8.648	1.00	25.23
ATOM	5208	O	ARG	65	10.798	-21.457	7.837	1.00	25.36
ATOM	5209	CB	ARG	65	8.671	-22.584	10.229	1.00	32.11

ATOM	5210	CG	ARG	65	8.534	-23.862	11.044	1.00	36.70
ATOM	5211	CD	ARG	65	8.240	-23.593	12.517	1.00	39.44
ATOM	5212	NE	ARG	65	9.362	-22.948	13.193	1.00	43.47
ATOM	5213	CZ	ARG	65	9.402	-22.698	14.501	1.00	44.88
ATOM	5214	NH1	ARG	65	8.370	-23.039	15.269	1.00	44.04
ATOM	5215	NH2	ARG	65	10.462	-22.088	15.033	1.00	45.04
ATOM	5216	H	ARG	65	9.782	-20.026	9.525	1.00	0.00
ATOM	5217	HE	ARG	65	10.108	-22.615	12.643	1.00	0.00
ATOM	5218	HH11ARG	65	7.558	-23.460	14.853	1.00	0.00	
ATOM	5219	HH12ARG	65	8.343	-22.855	16.256	1.00	0.00	
ATOM	5220	HH21ARG	65	11.215	-21.729	14.447	1.00	0.00	
ATOM	5221	HH22ARG	65	10.534	-21.873	16.005	1.00	0.00	
ATOM	5222	N	VAL	66	10.766	-23.643	8.350	1.00	21.70
ATOM	5223	CA	VAL	66	11.229	-24.089	7.041	1.00	20.46
ATOM	5224	C	VAL	66	10.324	-25.204	6.525	1.00	21.48
ATOM	5225	O	VAL	66	10.066	-26.179	7.226	1.00	22.72
ATOM	5226	CB	VAL	66	12.688	-24.634	7.113	1.00	18.81
ATOM	5227	CG1	VAL	66	13.088	-25.295	5.811	1.00	16.33
ATOM	5228	CG2	VAL	66	13.650	-23.521	7.434	1.00	19.18
ATOM	5229	H	VAL	66	10.618	-24.321	9.036	1.00	0.00
ATOM	5230	N	GLN	67	9.794	-25.029	5.324	1.00	21.29
ATOM	5231	CA	GLN	67	8.954	-26.043	4.717	1.00	21.93
ATOM	5232	C	GLN	67	9.736	-26.563	3.525	1.00	22.16
ATOM	5233	O	GLN	67	10.225	-25.778	2.713	1.00	22.63
ATOM	5234	CB	GLN	67	7.616	-25.451	4.266	1.00	22.66
ATOM	5235	CG	GLN	67	6.868	-26.279	3.219	1.00	23.88
ATOM	5236	CD	GLN	67	6.357	-27.623	3.729	1.00	25.03
ATOM	5237	OE1	GLN	67	7.028	-28.314	4.493	1.00	25.74
ATOM	5238	NE2	GLN	67	5.166	-27.996	3.299	1.00	26.88
ATOM	5239	H	GLN	67	9.947	-24.208	4.810	1.00	0.00
ATOM	5240	HE21GLN	67	4.667	-27.347	2.736	1.00	0.00	
ATOM	5241	HE22GLN	67	4.788	-28.873	3.476	1.00	0.00	
ATOM	5242	N	LEU	68	9.890	-27.878	3.446	1.00	22.55
ATOM	5243	CA	LEU	68	10.623	-28.501	2.354	1.00	22.49
ATOM	5244	C	LEU	68	9.829	-28.505	1.056	1.00	22.83
ATOM	5245	O	LEU	68	8.612	-28.297	1.053	1.00	23.71
ATOM	5246	CB	LEU	68	11.048	-29.923	2.728	1.00	23.19
ATOM	5247	CG	LEU	68	12.070	-30.026	3.866	1.00	23.24
ATOM	5248	CD1	LEU	68	12.418	-31.477	4.132	1.00	23.29
ATOM	5249	CD2	LEU	68	13.324	-29.243	3.514	1.00	23.25
ATOM	5250	H	LEU	68	9.445	-28.424	4.131	1.00	0.00
ATOM	5251	N	ARG	69	10.541	-28.753	-0.037	1.00	22.94
ATOM	5252	CA	ARG	69	9.987	-28.781	-1.381	1.00	23.73
ATOM	5253	C	ARG	69	8.608	-29.396	-1.466	1.00	24.51
ATOM	5254	O	ARG	69	8.375	-30.478	-0.939	1.00	25.35
ATOM	5255	CB	ARG	69	10.939	-29.543	-2.306	1.00	25.42
ATOM	5256	CG	ARG	69	10.762	-29.269	-3.804	1.00	27.05
ATOM	5257	CD	ARG	69	9.847	-30.264	-4.485	1.00	24.84
ATOM	5258	NE	ARG	69	9.927	-30.182	-5.942	1.00	25.28
ATOM	5259	CZ	ARG	69	8.922	-29.804	-6.730	1.00	27.02
ATOM	5260	NH1	ARG	69	7.759	-29.447	-6.198	1.00	27.15
ATOM	5261	NH2	ARG	69	9.036	-29.872	-8.052	1.00	26.49
ATOM	5262	H	ARG	69	11.506	-28.900	0.045	1.00	0.00
ATOM	5263	HE	ARG	69	10.786	-30.412	-6.367	1.00	0.00
ATOM	5264	HH11ARG	69	7.632	-29.437	-5.210	1.00	0.00	
ATOM	5265	HH12ARG	69	7.014	-29.183	-6.819	1.00	0.00	
ATOM	5266	HH21ARG	69	9.876	-30.222	-8.458	1.00	0.00	
ATOM	5267	HH22ARG	69	8.270	-29.647	-8.661	1.00	0.00	
ATOM	5268	N	GLU	70	7.698	-28.689	-2.128	1.00	26.15
ATOM	5269	CA	GLU	70	6.324	-29.149	-2.330	1.00	27.28
ATOM	5270	C	GLU	70	5.751	-28.420	-3.549	1.00	27.46
ATOM	5271	O	GLU	70	6.263	-27.372	-3.949	1.00	26.86
ATOM	5272	CB	GLU	70	5.462	-28.881	-1.096	1.00	26.84

106/176

ATOM	5273	CG	GLU	70	5.212	-27.421	-0.845	1.00	26.37
ATOM	5274	CD	GLU	70	4.344	-27.182	0.357	1.00	26.20
ATOM	5275	OE1	GLU	70	3.338	-27.896	0.533	1.00	26.22
ATOM	5276	OE2	GLU	70	4.672	-26.262	1.123	1.00	27.39
ATOM	5277	H	GLU	70	7.908	-27.791	-2.463	1.00	0.00
ATOM	5278	N	GLN	71	4.717	-28.990	-4.159	1.00	28.05
ATOM	5279	CA	GLN	71	4.122	-28.384	-5.347	1.00	28.30
ATOM	5280	C	GLN	71	3.251	-27.165	-5.088	1.00	28.87
ATOM	5281	O	GLN	71	3.266	-26.219	-5.880	1.00	29.84
ATOM	5282	CB	GLN	71	3.307	-29.410	-6.145	1.00	27.42
ATOM	5283	CG	GLN	71	4.126	-30.375	-6.980	1.00	26.65
ATOM	5284	CD	GLN	71	4.835	-29.720	-8.158	1.00	26.68
ATOM	5285	OE1	GLN	71	6.071	-29.740	-8.242	1.00	24.89
ATOM	5286	NE2	GLN	71	4.059	-29.157	-9.083	1.00	25.94
ATOM	5287	H	GLN	71	4.355	-29.814	-3.772	1.00	0.00
ATOM	5288	HE21	GLN	71	3.087	-29.106	-9.032	1.00	0.00
ATOM	5289	HE22	GLN	71	4.551	-28.805	-9.865	1.00	0.00
ATOM	5290	N	HIS	72	2.479	-27.189	-4.005	1.00	27.97
ATOM	5291	CA	HIS	72	1.580	-26.081	-3.709	1.00	27.88
ATOM	5292	C	HIS	72	1.780	-25.461	-2.332	1.00	28.94
ATOM	5293	O	HIS	72	1.205	-25.900	-1.335	1.00	27.69
ATOM	5294	CB	HIS	72	0.138	-26.529	-3.910	1.00	26.91
ATOM	5295	CG	HIS	72	-0.131	-27.067	-5.277	1.00	25.69
ATOM	5296	ND1	HIS	72	-0.480	-26.261	-6.336	1.00	25.93
ATOM	5297	CD2	HIS	72	-0.053	-28.325	-5.771	1.00	25.84
ATOM	5298	CE1	HIS	72	-0.601	-26.994	-7.427	1.00	26.06
ATOM	5299	NE2	HIS	72	-0.346	-28.251	-7.111	1.00	27.28
ATOM	5300	H	HIS	72	2.542	-27.897	-3.328	1.00	0.00
ATOM	5301	HD1	HIS	72	-0.597	-25.290	-6.267	1.00	0.00
ATOM	5302	HE2	HIS	72	-0.369	-28.973	-7.776	1.00	0.00
ATOM	5303	N	LEU	73	2.492	-24.339	-2.347	1.00	31.53
ATOM	5304	CA	LEU	73	2.866	-23.568	-1.169	1.00	33.59
ATOM	5305	C	LEU	73	2.317	-23.839	0.225	1.00	36.07
ATOM	5306	O	LEU	73	3.102	-24.148	1.114	1.00	39.04
ATOM	5307	CB	LEU	73	2.789	-22.070	-1.452	1.00	32.56
ATOM	5308	CG	LEU	73	4.150	-21.379	-1.565	1.00	31.47
ATOM	5309	CD1	LEU	73	3.940	-19.892	-1.810	1.00	32.49
ATOM	5310	CD2	LEU	73	4.978	-21.609	-0.301	1.00	30.25
ATOM	5311	H	LEU	73	2.769	-23.988	-3.218	1.00	0.00
ATOM	5312	N	TYR	74	1.016	-23.674	0.460	1.00	35.27
ATOM	5313	CA	TYR	74	0.496	-23.873	1.817	1.00	35.63
ATOM	5314	C	TYR	74	-0.400	-25.083	2.050	1.00	38.84
ATOM	5315	O	TYR	74	-0.816	-25.341	3.182	1.00	39.81
ATOM	5316	CB	TYR	74	-0.249	-22.621	2.294	1.00	32.31
ATOM	5317	CG	TYR	74	0.495	-21.327	2.081	1.00	30.31
ATOM	5318	CD1	TYR	74	0.379	-20.633	0.881	1.00	30.17
ATOM	5319	CD2	TYR	74	1.310	-20.793	3.078	1.00	29.05
ATOM	5320	CE1	TYR	74	1.058	-19.441	0.677	1.00	29.66
ATOM	5321	CE2	TYR	74	1.990	-19.598	2.884	1.00	27.82
ATOM	5322	CZ	TYR	74	1.860	-18.928	1.681	1.00	28.80
ATOM	5323	OH	TYR	74	2.520	-17.735	1.474	1.00	30.33
ATOM	5324	H	TYR	74	0.413	-23.450	-0.263	1.00	0.00
ATOM	5325	HH	TYR	74	2.489	-17.232	2.293	1.00	0.00
ATOM	5326	N	TYR	75	-0.709	-25.838	1.006	1.00	42.14
ATOM	5327	CA	TYR	75	-1.590	-26.977	1.187	1.00	44.60
ATOM	5328	C	TYR	75	-0.829	-28.283	1.332	1.00	45.33
ATOM	5329	O	TYR	75	-0.297	-28.837	0.364	1.00	45.82
ATOM	5330	CB	TYR	75	-2.693	-26.948	0.115	1.00	47.59
ATOM	5331	CG	TYR	75	-3.027	-28.203	-0.653	1.00	50.92
ATOM	5332	CD1	TYR	75	-3.989	-29.105	-0.185	1.00	52.26
ATOM	5333	CD2	TYR	75	-2.491	-28.413	-1.925	1.00	53.02
ATOM	5334	CE1	TYR	75	-4.420	-30.178	-0.978	1.00	54.44
ATOM	5335	CE2	TYR	75	-2.911	-29.476	-2.727	1.00	54.89

109/126

ATOM	5336	CZ	TYR	75	-3.878	-30.353	-2.254	1.00	54.87
ATOM	5337	OH	TYR	75	-4.332	-31.361	-3.080	1.00	53.68
ATOM	5338	H	TYR	75	-0.236	-25.700	0.161	1.00	0.00
ATOM	5339	HH	TYR	75	-4.152	-31.155	-4.002	1.00	0.00
ATOM	5340	N	GLN	79	-0.738	-28.694	2.599	1.00	45.60
ATOM	5341	CA	GLN	79	-0.054	-29.895	3.094	1.00	45.61
ATOM	5342	C	GLN	79	1.367	-29.598	3.580	1.00	43.77
ATOM	5343	O	GLN	79	2.350	-30.188	3.124	1.00	43.51
ATOM	5344	CB	GLN	79	-0.105	-31.067	2.103	1.00	47.43
ATOM	5345	CG	GLN	79	-1.449	-31.801	2.135	1.00	50.20
ATOM	5346	CD	GLN	79	-1.484	-33.048	1.259	1.00	52.53
ATOM	5347	OE1	GLN	79	-2.469	-33.793	1.266	1.00	53.26
ATOM	5348	NE2	GLN	79	-0.414	-33.281	0.501	1.00	52.61
ATOM	5349	H	GLN	79	-1.122	-28.087	3.270	1.00	0.00
ATOM	5350	HE21	GLN	79	0.367	-32.685	0.505	1.00	0.00
ATOM	5351	HE22	GLN	79	-0.467	-34.082	-0.053	1.00	0.00
ATOM	5352	N	ASP	80	1.433	-28.704	4.561	1.00	41.53
ATOM	5353	CA	ASP	80	2.680	-28.274	5.168	1.00	39.70
ATOM	5354	C	ASP	80	3.221	-29.229	6.207	1.00	39.35
ATOM	5355	O	ASP	80	2.479	-29.951	6.870	1.00	38.96
ATOM	5356	CB	ASP	80	2.517	-26.896	5.817	1.00	38.57
ATOM	5357	CG	ASP	80	2.666	-25.762	4.828	1.00	36.42
ATOM	5358	OD1	ASP	80	3.299	-25.979	3.780	1.00	34.50
ATOM	5359	OD2	ASP	80	2.169	-24.647	5.108	1.00	34.84
ATOM	5360	H	ASP	80	0.623	-28.279	4.894	1.00	0.00
ATOM	5361	N	GLN	81	4.534	-29.186	6.361	1.00	40.12
ATOM	5362	CA	GLN	81	5.260	-29.998	7.320	1.00	41.15
ATOM	5363	C	GLN	81	6.411	-29.085	7.711	1.00	38.66
ATOM	5364	O	GLN	81	7.523	-29.186	7.188	1.00	38.98
ATOM	5365	CB	GLN	81	5.780	-31.290	6.673	1.00	46.02
ATOM	5366	CG	GLN	81	4.691	-32.311	6.309	1.00	51.19
ATOM	5367	CD	GLN	81	5.234	-33.723	6.062	1.00	53.98
ATOM	5368	OE1	GLN	81	4.560	-34.560	5.456	1.00	55.34
ATOM	5369	NE2	GLN	81	6.441	-33.999	6.557	1.00	55.38
ATOM	5370	H	GLN	81	5.060	-28.563	5.806	1.00	0.00
ATOM	5371	HE21	GLN	81	6.962	-33.327	7.047	1.00	0.00
ATOM	5372	HE22	GLN	81	6.750	-34.911	6.389	1.00	0.00
ATOM	5373	N	LEU	82	6.106	-28.150	8.599	1.00	34.96
ATOM	5374	CA	LEU	82	7.073	-27.164	9.047	1.00	31.64
ATOM	5375	C	LEU	82	8.137	-27.671	10.001	1.00	29.83
ATOM	5376	O	LEU	82	7.853	-28.393	10.952	1.00	29.20
ATOM	5377	CB	LEU	82	6.339	-25.961	9.630	1.00	30.36
ATOM	5378	CG	LEU	82	5.488	-25.260	8.570	1.00	27.84
ATOM	5379	CD1	LEU	82	4.432	-24.393	9.210	1.00	27.47
ATOM	5380	CD2	LEU	82	6.392	-24.462	7.651	1.00	28.20
ATOM	5381	H	LEU	82	5.216	-28.133	8.998	1.00	0.00
ATOM	5382	N	LEU	83	9.371	-27.288	9.702	1.00	29.17
ATOM	5383	CA	LEU	83	10.540	-27.649	10.480	1.00	28.83
ATOM	5384	C	LEU	83	11.067	-26.383	11.142	1.00	28.88
ATOM	5385	O	LEU	83	10.995	-25.303	10.565	1.00	28.95
ATOM	5386	CB	LEU	83	11.612	-28.208	9.546	1.00	28.59
ATOM	5387	CG	LEU	83	11.178	-29.387	8.675	1.00	29.06
ATOM	5388	CD1	LEU	83	12.237	-29.709	7.629	1.00	27.57
ATOM	5389	CD2	LEU	83	10.911	-30.592	9.567	1.00	30.79
ATOM	5390	H	LEU	83	9.524	-26.778	8.887	1.00	0.00
ATOM	5391	N	PRO	84	11.527	-26.486	12.390	1.00	28.99
ATOM	5392	CA	PRO	84	12.063	-25.334	13.121	1.00	28.88
ATOM	5393	C	PRO	84	13.518	-25.122	12.733	1.00	28.83
ATOM	5394	O	PRO	84	14.154	-26.032	12.202	1.00	28.32
ATOM	5395	CB	PRO	84	11.963	-25.781	14.582	1.00	29.96
ATOM	5396	CG	PRO	84	10.934	-26.880	14.556	1.00	30.52
ATOM	5397	CD	PRO	84	11.294	-27.609	13.305	1.00	29.53
ATOM	5398	N	VAL	85	14.047	-23.936	13.008	1.00	29.60

108/176

ATOM	5399	CA	VAL	85	15.434	-23.637	12.684	1.00	30.40
ATOM	5400	C	VAL	85	16.223	-23.578	13.980	1.00	32.56
ATOM	5401	O	VAL	85	15.781	-22.950	14.939	1.00	33.84
ATOM	5402	CB	VAL	85	15.563	-22.296	11.941	1.00	29.41
ATOM	5403	CG1	VAL	85	17.017	-22.004	11.623	1.00	29.14
ATOM	5404	CG2	VAL	85	14.767	-22.339	10.660	1.00	29.48
ATOM	5405	H	VAL	85	13.551	-23.237	13.476	1.00	0.00
ATOM	5406	N	SER	86	17.366	-24.255	14.011	1.00	34.51
ATOM	5407	CA	SER	86	18.223	-24.287	15.192	1.00	36.67
ATOM	5408	C	SER	86	19.255	-23.168	15.204	1.00	38.81
ATOM	5409	O	SER	86	19.760	-22.803	16.269	1.00	40.54
ATOM	5410	CB	SER	86	18.952	-25.632	15.308	1.00	36.19
ATOM	5411	OG	SER	86	19.754	-25.885	14.166	1.00	35.63
ATOM	5412	H	SER	86	17.684	-24.736	13.232	1.00	0.00
ATOM	5413	HG	SER	86	20.533	-26.431	14.359	1.00	0.00
ATOM	5414	N	ARG	87	19.567	-22.614	14.035	1.00	39.15
ATOM	5415	CA	ARG	87	20.570	-21.557	13.972	1.00	39.04
ATOM	5416	C	ARG	87	20.505	-20.751	12.675	1.00	36.67
ATOM	5417	O	ARG	87	20.151	-21.285	11.629	1.00	37.84
ATOM	5418	CB	ARG	87	21.951	-22.195	14.146	1.00	41.86
ATOM	5419	CG	ARG	87	23.109	-21.237	14.314	1.00	47.25
ATOM	5420	CD	ARG	87	24.276	-21.931	15.009	1.00	50.76
ATOM	5421	NE	ARG	87	24.498	-23.287	14.504	1.00	54.49
ATOM	5422	CZ	ARG	87	25.670	-23.749	14.072	1.00	56.55
ATOM	5423	NH1	ARG	87	26.747	-22.965	14.078	1.00	56.52
ATOM	5424	NH2	ARG	87	25.764	-25.000	13.633	1.00	57.67
ATOM	5425	H	ARG	87	19.150	-22.963	13.217	1.00	0.00
ATOM	5426	HE	ARG	87	23.732	-23.924	14.491	1.00	0.00
ATOM	5427	HH1	ARG	87	26.662	-22.022	14.413	1.00	0.00
ATOM	5428	HH2	ARG	87	27.641	-23.278	13.760	1.00	0.00
ATOM	5429	HH3	ARG	87	24.928	-25.593	13.624	1.00	0.00
ATOM	5430	HH4	ARG	87	26.576	-25.450	13.271	1.00	0.00
ATOM	5431	N	ILE	88	20.818	-19.460	12.754	1.00	32.92
ATOM	5432	CA	ILE	88	20.812	-18.584	11.587	1.00	30.06
ATOM	5433	C	ILE	88	22.189	-17.935	11.457	1.00	29.04
ATOM	5434	O	ILE	88	22.618	-17.168	12.324	1.00	29.52
ATOM	5435	CB	ILE	88	19.724	-17.484	11.695	1.00	29.11
ATOM	5436	CG1	ILE	88	18.335	-18.121	11.747	1.00	28.92
ATOM	5437	CG2	ILE	88	19.796	-16.546	10.499	1.00	29.01
ATOM	5438	H	ILE	88	21.095	-19.067	13.607	1.00	0.00
ATOM	5439	CD	ILE	88	17.209	-17.128	11.905	1.00	28.54
ATOM	5440	N	ILE	89	22.896	-18.276	10.388	1.00	26.85
ATOM	5441	CA	ILE	89	24.223	-17.740	10.146	1.00	25.46
ATOM	5442	C	ILE	89	24.246	-16.855	8.895	1.00	25.86
ATOM	5443	O	ILE	89	24.178	-17.351	7.768	1.00	25.03
ATOM	5444	CB	ILE	89	25.237	-18.882	9.985	1.00	24.73
ATOM	5445	CG1	ILE	89	25.132	-19.835	11.169	1.00	23.29
ATOM	5446	CG2	ILE	89	26.652	-18.336	9.899	1.00	25.35
ATOM	5447	H	ILE	89	22.536	-18.911	9.737	1.00	0.00
ATOM	5448	CD	ILE	89	26.061	-20.988	11.069	1.00	23.27
ATOM	5449	N	VAL	90	24.285	-15.543	9.108	1.00	25.60
ATOM	5450	CA	VAL	90	24.333	-14.570	8.019	1.00	25.27
ATOM	5451	C	VAL	90	25.803	-14.232	7.783	1.00	26.43
ATOM	5452	O	VAL	90	26.621	-14.381	8.692	1.00	28.33
ATOM	5453	CB	VAL	90	23.558	-13.273	8.397	1.00	24.27
ATOM	5454	CG1	VAL	90	23.860	-12.148	7.417	1.00	23.87
ATOM	5455	CG2	VAL	90	22.067	-13.543	8.404	1.00	24.36
ATOM	5456	H	VAL	90	24.307	-15.220	10.030	1.00	0.00
ATOM	5457	N	HIS	91	26.158	-13.828	6.564	1.00	25.18
ATOM	5458	CA	HIS	91	27.538	-13.461	6.291	1.00	23.69
ATOM	5459	C	HIS	91	27.865	-12.134	6.968	1.00	25.88
ATOM	5460	O	HIS	91	27.150	-11.152	6.806	1.00	27.46
ATOM	5461	CB	HIS	91	27.792	-13.344	4.797	1.00	20.41

109/1176

ATOM	5462	CG	HIS	91	29.244	-13.303	4.450	1.00	17.87
ATOM	5463	ND1	HIS	91	29.941	-14.416	4.037	1.00	17.67
ATOM	5464	CD2	HIS	91	30.144	-12.293	4.491	1.00	17.69
ATOM	5465	CE1	HIS	91	31.205	-14.097	3.836	1.00	16.11
ATOM	5466	NE2	HIS	91	31.355	-12.815	4.106	1.00	17.58
ATOM	5467	H	HIS	91	25.502	-13.828	5.836	1.00	0.00
ATOM	5468	HD1	HIS	91	29.559	-15.316	3.916	1.00	0.00
ATOM	5469	HE2	HIS	91	32.231	-12.350	4.057	1.00	0.00
ATOM	5470	N	PRO	92	28.983	-12.081	7.703	1.00	27.94
ATOM	5471	CA	PRO	92	29.476	-10.907	8.436	1.00	27.75
ATOM	5472	C	PRO	92	29.511	-9.569	7.692	1.00	27.23
ATOM	5473	O	PRO	92	29.109	-8.547	8.234	1.00	26.38
ATOM	5474	CB	PRO	92	30.881	-11.342	8.842	1.00	28.69
ATOM	5475	CG	PRO	92	30.688	-12.798	9.123	1.00	29.76
ATOM	5476	CD	PRO	92	29.848	-13.251	7.951	1.00	29.47
ATOM	5477	N	GLN	93	30.013	-9.569	6.465	1.00	28.86
ATOM	5478	CA	GLN	93	30.124	-8.335	5.686	1.00	29.95
ATOM	5479	C	GLN	93	28.828	-7.875	5.050	1.00	27.27
ATOM	5480	O	GLN	93	28.832	-6.989	4.202	1.00	27.53
ATOM	5481	CB	GLN	93	31.193	-8.493	4.599	1.00	34.89
ATOM	5482	CG	GLN	93	32.615	-8.664	5.129	1.00	40.63
ATOM	5483	CD	GLN	93	33.482	-9.485	4.187	1.00	44.77
ATOM	5484	OE1	GLN	93	33.863	-10.617	4.504	1.00	47.44
ATOM	5485	NE2	GLN	93	33.750	-8.945	3.004	1.00	46.56
ATOM	5486	H	GLN	93	30.325	-10.403	6.086	1.00	0.00
ATOM	5487	HE21	GLN	93	33.374	-8.067	2.790	1.00	0.00
ATOM	5488	HE22	GLN	93	34.338	-9.464	2.415	1.00	0.00
ATOM	5489	N	PHE	94	27.719	-8.465	5.462	1.00	25.36
ATOM	5490	CA	PHE	94	26.439	-8.103	4.892	1.00	23.30
ATOM	5491	C	PHE	94	25.658	-7.043	5.642	1.00	23.06
ATOM	5492	O	PHE	94	25.521	-7.097	6.859	1.00	22.78
ATOM	5493	CB	PHE	94	25.553	-9.337	4.733	1.00	22.18
ATOM	5494	CG	PHE	94	24.148	-9.015	4.304	1.00	22.62
ATOM	5495	CD1	PHE	94	23.863	-8.710	2.976	1.00	23.07
ATOM	5496	CD2	PHE	94	23.115	-8.981	5.234	1.00	22.45
ATOM	5497	CE1	PHE	94	22.576	-8.372	2.582	1.00	21.22
ATOM	5498	CE2	PHE	94	21.827	-8.646	4.848	1.00	21.68
ATOM	5499	CZ	PHE	94	21.558	-8.341	3.519	1.00	21.64
ATOM	5500	H	PHE	94	27.686	-9.148	6.159	1.00	0.00
ATOM	5501	N	TYR	95	25.123	-6.091	4.883	1.00	22.81
ATOM	5502	CA	TYR	95	24.280	-5.038	5.427	1.00	20.65
ATOM	5503	C	TYR	95	23.194	-4.679	4.417	1.00	20.98
ATOM	5504	O	TYR	95	22.070	-4.338	4.803	1.00	21.34
ATOM	5505	CB	TYR	95	25.068	-3.777	5.788	1.00	18.90
ATOM	5506	CG	TYR	95	24.149	-2.719	6.355	1.00	18.68
ATOM	5507	CD1	TYR	95	23.578	-2.873	7.622	1.00	19.10
ATOM	5508	CD2	TYR	95	23.755	-1.625	5.588	1.00	15.97
ATOM	5509	CE1	TYR	95	22.633	-1.974	8.105	1.00	18.09
ATOM	5510	CE2	TYR	95	22.814	-0.723	6.059	1.00	16.50
ATOM	5511	CZ	TYR	95	22.254	-0.900	7.316	1.00	18.07
ATOM	5512	OH	TYR	95	21.315	-0.005	7.782	1.00	18.55
ATOM	5513	H	TYR	95	25.344	-6.145	3.934	1.00	0.00
ATOM	5514	HH	TYR	95	20.866	-0.394	8.555	1.00	0.00
ATOM	5515	N	THR	96	23.521	-4.819	3.131	1.00	21.44
ATOM	5516	CA	THR	96	22.618	-4.484	2.028	1.00	21.14
ATOM	5517	C	THR	96	22.903	-5.343	0.792	1.00	21.90
ATOM	5518	O	THR	96	24.062	-5.616	0.484	1.00	23.14
ATOM	5519	CB	THR	96	22.799	-3.001	1.646	1.00	20.72
ATOM	5520	OG1	THR	96	22.102	-2.170	2.579	1.00	20.25
ATOM	5521	CG2	THR	96	22.309	-2.739	0.262	1.00	21.80
ATOM	5522	H	THR	96	24.396	-5.168	2.868	1.00	0.00
ATOM	5523	HG1	THR	96	22.131	-1.265	2.253	1.00	0.00
ATOM	5524	N	ALA	97	21.850	-5.711	0.059	1.00	22.79

110/176

ATOM	5525	CA	ALA	97	21.972	-6.536	-1.153	1.00	22.89
ATOM	5526	C	ALA	97	22.844	-5.864	-2.209	1.00	24.01
ATOM	5527	O	ALA	97	23.755	-6.478	-2.770	1.00	23.73
ATOM	5528	CB	ALA	97	20.591	-6.823	-1.737	1.00	20.14
ATOM	5529	H	ALA	97	20.967	-5.419	0.359	1.00	0.00
ATOM	5530	N	GLN	98	22.580	-4.579	-2.434	1.00	24.56
ATOM	5531	CA	GLN	98	23.305	-3.788	-3.425	1.00	23.73
ATOM	5532	C	GLN	98	24.787	-3.690	-3.110	1.00	23.19
ATOM	5533	O	GLN	98	25.623	-3.622	-4.007	1.00	23.76
ATOM	5534	CB	GLN	98	22.701	-2.386	-3.534	1.00	23.17
ATOM	5535	CG	GLN	98	21.249	-2.349	-4.013	1.00	23.51
ATOM	5536	CD	GLN	98	20.275	-2.957	-3.017	1.00	23.26
ATOM	5537	OE1	GLN	98	20.129	-2.471	-1.900	1.00	23.95
ATOM	5538	NE2	GLN	98	19.622	-4.037	-3.408	1.00	23.99
ATOM	5539	H	GLN	98	21.904	-4.150	-1.877	1.00	0.00
ATOM	5540	HE21	GLN	98	19.794	-4.391	-4.306	1.00	0.00
ATOM	5541	HE22	GLN	98	18.971	-4.433	-2.791	1.00	0.00
ATOM	5542	N	ILE	99	25.110	-3.663	-1.827	1.00	23.76
ATOM	5543	CA	ILE	99	26.496	-3.575	-1.407	1.00	24.99
ATOM	5544	C	ILE	99	27.202	-4.907	-1.616	1.00	25.61
ATOM	5545	O	ILE	99	28.359	-4.934	-2.035	1.00	27.44
ATOM	5546	CB	ILE	99	26.607	-3.128	0.055	1.00	25.61
ATOM	5547	CG1	ILE	99	26.091	-1.690	0.192	1.00	26.26
ATOM	5548	CG2	ILE	99	28.041	-3.229	0.519	1.00	26.62
ATOM	5549	H	ILE	99	24.412	-3.721	-1.153	1.00	0.00
ATOM	5550	CD	ILE	99	26.142	-1.131	1.596	1.00	25.64
ATOM	5551	N	GLY	100	26.515	-6.006	-1.315	1.00	25.29
ATOM	5552	CA	GLY	100	27.100	-7.322	-1.509	1.00	23.95
ATOM	5553	C	GLY	100	27.054	-8.204	-0.276	1.00	23.20
ATOM	5554	O	GLY	100	26.540	-7.784	0.767	1.00	22.23
ATOM	5555	H	GLY	100	25.643	-5.948	-0.876	1.00	0.00
ATOM	5556	N	ALA	101	27.595	-9.420	-0.402	1.00	22.09
ATOM	5557	CA	ALA	101	27.645	-10.397	0.683	1.00	20.59
ATOM	5558	C	ALA	101	26.260	-10.844	1.123	1.00	20.34
ATOM	5559	O	ALA	101	26.012	-11.078	2.310	1.00	21.30
ATOM	5560	CB	ALA	101	28.429	-9.838	1.873	1.00	20.59
ATOM	5561	H	ALA	101	28.019	-9.686	-1.261	1.00	0.00
ATOM	5562	N	ASP	102	25.368	-10.999	0.156	1.00	18.24
ATOM	5563	CA	ASP	102	24.005	-11.418	0.439	1.00	16.15
ATOM	5564	C	ASP	102	23.897	-12.933	0.428	1.00	16.12
ATOM	5565	O	ASP	102	23.564	-13.529	-0.599	1.00	15.74
ATOM	5566	CB	ASP	102	23.069	-10.844	-0.613	1.00	15.16
ATOM	5567	CG	ASP	102	21.626	-10.942	-0.222	1.00	14.32
ATOM	5568	OD1	ASP	102	21.291	-11.656	0.738	1.00	13.59
ATOM	5569	OD2	ASP	102	20.802	-10.275	-0.870	1.00	16.56
ATOM	5570	H	ASP	102	25.639	-10.827	-0.768	1.00	0.00
ATOM	5571	N	ILE	103	24.188	-13.559	1.563	1.00	15.23
ATOM	5572	CA	ILE	103	24.113	-15.012	1.668	1.00	14.17
ATOM	5573	C	ILE	103	24.041	-15.431	3.128	1.00	15.92
ATOM	5574	O	ILE	103	24.574	-14.741	4.004	1.00	17.27
ATOM	5575	CB	ILE	103	25.318	-15.700	0.976	1.00	11.92
ATOM	5576	CG1	ILE	103	25.110	-17.218	0.954	1.00	11.52
ATOM	5577	CG2	ILE	103	26.614	-15.335	1.667	1.00	8.11
ATOM	5578	H	ILE	103	24.452	-13.034	2.349	1.00	0.00
ATOM	5579	CD	ILE	103	26.013	-17.957	-0.004	1.00	8.58
ATOM	5580	N	ALA	104	23.360	-16.544	3.391	1.00	16.74
ATOM	5581	CA	ALA	104	23.208	-17.050	4.749	1.00	17.15
ATOM	5582	C	ALA	104	22.887	-18.544	4.781	1.00	18.33
ATOM	5583	O	ALA	104	22.475	-19.134	3.773	1.00	17.78
ATOM	5584	CB	ALA	104	22.130	-16.263	5.483	1.00	15.16
ATOM	5585	H	ALA	104	22.928	-17.049	2.677	1.00	0.00
ATOM	5586	N	LEU	105	23.106	-19.143	5.947	1.00	20.15
ATOM	5587	CA	LEU	105	22.857	-20.563	6.186	1.00	21.24

111/196

ATOM	5588	C	LEU	105	21.902	-20.733	7.363	1.00	22.18
ATOM	5589	O	LEU	105	22.102	-20.144	8.426	1.00	22.09
ATOM	5590	CB	LEU	105	24.164	-21.283	6.520	1.00	19.66
ATOM	5591	CG	LEU	105	25.216	-21.373	5.428	1.00	18.88
ATOM	5592	CD1	LEU	105	26.535	-21.826	6.025	1.00	19.97
ATOM	5593	CD2	LEU	105	24.739	-22.326	4.350	1.00	19.61
ATOM	5594	H	LEU	105	23.461	-18.600	6.670	1.00	0.00
ATOM	5595	N	LEU	106	20.855	-21.522	7.161	1.00	23.24
ATOM	5596	CA	LEU	106	19.883	-21.789	8.209	1.00	24.80
ATOM	5597	C	LEU	106	20.140	-23.222	8.659	1.00	27.36
ATOM	5598	O	LEU	106	20.129	-24.135	7.829	1.00	29.36
ATOM	5599	CB	LEU	106	18.452	-21.682	7.662	1.00	22.40
ATOM	5600	CG	LEU	106	17.949	-20.421	6.945	1.00	19.82
ATOM	5601	CD1	LEU	106	16.500	-20.643	6.572	1.00	18.52
ATOM	5602	CD2	LEU	106	18.070	-19.181	7.813	1.00	19.34
ATOM	5603	H	LEU	106	20.752	-21.927	6.289	1.00	0.00
ATOM	5604	N	GLU	107	20.444	-23.425	9.935	1.00	28.30
ATOM	5605	CA	GLU	107	20.671	-24.777	10.415	1.00	30.97
ATOM	5606	C	GLU	107	19.374	-25.338	10.954	1.00	31.56
ATOM	5607	O	GLU	107	18.707	-24.696	11.755	1.00	32.38
ATOM	5608	CB	GLU	107	21.730	-24.833	11.509	1.00	33.24
ATOM	5609	CG	GLU	107	21.909	-26.249	12.043	1.00	36.31
ATOM	5610	CD	GLU	107	23.049	-26.377	13.012	1.00	38.81
ATOM	5611	OE1	GLU	107	24.070	-26.995	12.643	1.00	40.32
ATOM	5612	OE2	GLU	107	22.948	-25.852	14.143	1.00	40.95
ATOM	5613	H	GLU	107	20.472	-22.672	10.541	1.00	0.00
ATOM	5614	N	LEU	108	19.017	-26.530	10.503	1.00	31.89
ATOM	5615	CA	LEU	108	17.799	-27.180	10.942	1.00	34.62
ATOM	5616	C	LEU	108	18.095	-27.931	12.228	1.00	38.46
ATOM	5617	O	LEU	108	19.217	-28.384	12.432	1.00	39.52
ATOM	5618	CB	LEU	108	17.316	-28.150	9.864	1.00	33.85
ATOM	5619	CG	LEU	108	17.126	-27.540	8.473	1.00	32.27
ATOM	5620	CD1	LEU	108	16.728	-28.611	7.467	1.00	30.91
ATOM	5621	CD2	LEU	108	16.071	-26.451	8.543	1.00	31.50
ATOM	5622	H	LEU	108	19.626	-26.977	9.894	1.00	0.00
ATOM	5623	N	GLU	109	17.090	-28.076	13.087	1.00	42.87
ATOM	5624	CA	GLU	109	17.258	-28.785	14.360	1.00	47.08
ATOM	5625	C	GLU	109	17.692	-30.240	14.187	1.00	50.76
ATOM	5626	O	GLU	109	18.284	-30.832	15.100	1.00	52.06
ATOM	5627	CB	GLU	109	15.966	-28.753	15.184	1.00	46.61
ATOM	5628	CG	GLU	109	15.781	-27.525	16.068	1.00	47.13
ATOM	5629	CD	GLU	109	14.501	-27.583	16.906	1.00	47.76
ATOM	5630	OE1	GLU	109	14.123	-26.537	17.473	1.00	47.83
ATOM	5631	OE2	GLU	109	13.866	-28.660	16.998	1.00	47.19
ATOM	5632	H	GLU	109	16.213	-27.699	12.866	1.00	0.00
ATOM	5633	N	GLU	110	17.404	-30.815	13.020	1.00	52.59
ATOM	5634	CA	GLU	110	17.756	-32.203	12.759	1.00	53.86
ATOM	5635	C	GLU	110	17.811	-32.464	11.261	1.00	53.25
ATOM	5636	O	GLU	110	17.112	-31.803	10.491	1.00	53.33
ATOM	5637	CB	GLU	110	16.714	-33.126	13.387	1.00	56.53
ATOM	5638	CG	GLU	110	17.275	-34.465	13.822	1.00	60.87
ATOM	5639	CD	GLU	110	16.246	-35.575	13.815	1.00	63.05
ATOM	5640	OE1	GLU	110	15.031	-35.271	13.857	1.00	64.92
ATOM	5641	OE2	GLU	110	16.664	-36.755	13.769	1.00	63.74
ATOM	5642	H	GLU	110	16.967	-30.311	12.304	1.00	0.00
ATOM	5643	N	PRO	111	18.668	-33.404	10.827	1.00	52.58
ATOM	5644	CA	PRO	111	18.803	-33.739	9.408	1.00	52.57
ATOM	5645	C	PRO	111	17.571	-34.420	8.831	1.00	52.09
ATOM	5646	O	PRO	111	16.993	-35.309	9.449	1.00	52.64
ATOM	5647	CB	PRO	111	20.016	-34.672	9.391	1.00	52.54
ATOM	5648	CG	PRO	111	19.971	-35.311	10.732	1.00	52.26
ATOM	5649	CD	PRO	111	19.669	-34.135	11.621	1.00	52.48
ATOM	5650	N	VAL	112	17.165	-33.972	7.651	1.00	51.73

112/126

ATOM	5651	CA	VAL	112	16.011	-34.524	6.959	1.00	51.86
ATOM	5652	C	VAL	112	16.417	-35.861	6.363	1.00	53.40
ATOM	5653	O	VAL	112	17.596	-36.083	6.087	1.00	54.58
ATOM	5654	CB	VAL	112	15.558	-33.599	5.804	1.00	50.44
ATOM	5655	CG1	VAL	112	15.323	-32.192	6.315	1.00	49.69
ATOM	5656	CG2	VAL	112	16.589	-33.595	4.682	1.00	49.08
ATOM	5657	H	VAL	112	17.664	-33.234	7.269	1.00	0.00
ATOM	5658	N	LYS	113	15.449	-36.749	6.154	1.00	54.48
ATOM	5659	CA	LYS	113	15.752	-38.044	5.559	1.00	55.92
ATOM	5660	C	LYS	113	15.645	-37.879	4.040	1.00	56.43
ATOM	5661	O	LYS	113	14.581	-38.065	3.442	1.00	55.93
ATOM	5662	CB	LYS	113	14.805	-39.129	6.094	1.00	56.81
ATOM	5663	CG	LYS	113	15.481	-40.490	6.286	1.00	56.61
ATOM	5664	CD	LYS	113	14.673	-41.410	7.193	1.00	55.90
ATOM	5665	CE	LYS	113	15.441	-42.687	7.520	1.00	55.73
ATOM	5666	NZ	LYS	113	15.661	-43.558	6.330	1.00	55.26
ATOM	5667	H	LYS	113	14.523	-36.532	6.380	1.00	0.00
ATOM	5668	HZ1	LYS	113	16.157	-43.039	5.576	1.00	0.00
ATOM	5669	HZ2	LYS	113	14.734	-43.872	5.974	1.00	0.00
ATOM	5670	HZ3	LYS	113	16.218	-44.390	6.611	1.00	0.00
ATOM	5671	N	VAL	114	16.763	-37.471	3.446	1.00	58.00
ATOM	5672	CA	VAL	114	16.881	-37.216	2.012	1.00	59.49
ATOM	5673	C	VAL	114	16.420	-38.318	1.063	1.00	59.56
ATOM	5674	O	VAL	114	17.173	-39.240	0.740	1.00	60.42
ATOM	5675	CB	VAL	114	18.329	-36.794	1.628	1.00	60.33
ATOM	5676	CG1	VAL	114	18.593	-35.361	2.072	1.00	61.61
ATOM	5677	CG2	VAL	114	19.350	-37.737	2.260	1.00	60.64
ATOM	5678	H	VAL	114	17.548	-37.339	4.010	1.00	0.00
ATOM	5679	N	SER	115	15.180	-38.203	0.602	1.00	58.74
ATOM	5680	CA	SER	115	14.618	-39.171	-0.328	1.00	57.94
ATOM	5681	C	SER	115	14.887	-38.683	-1.753	1.00	58.30
ATOM	5682	O	SER	115	15.505	-37.633	-1.954	1.00	58.38
ATOM	5683	CB	SER	115	13.109	-39.301	-0.097	1.00	57.48
ATOM	5684	OG	SER	115	12.431	-38.072	-0.322	1.00	56.56
ATOM	5685	H	SER	115	14.663	-37.426	0.901	1.00	0.00
ATOM	5686	HG	SER	115	12.349	-37.552	0.510	1.00	0.00
ATOM	5687	N	SER	116	14.414	-39.426	-2.748	1.00	58.64
ATOM	5688	CA	SER	116	14.602	-39.010	-4.137	1.00	58.55
ATOM	5689	C	SER	116	13.640	-37.867	-4.453	1.00	57.96
ATOM	5690	O	SER	116	13.676	-37.284	-5.532	1.00	58.14
ATOM	5691	CB	SER	116	14.353	-40.179	-5.095	1.00	58.97
ATOM	5692	OG	SER	116	14.596	-39.805	-6.442	1.00	59.12
ATOM	5693	H	SER	116	14.003	-40.296	-2.564	1.00	0.00
ATOM	5694	HG	SER	116	14.563	-40.578	-7.023	1.00	0.00
ATOM	5695	N	HIS	117	12.804	-37.531	-3.480	1.00	57.28
ATOM	5696	CA	HIS	117	11.819	-36.477	-3.643	1.00	57.04
ATOM	5697	C	HIS	117	12.306	-35.227	-2.929	1.00	53.82
ATOM	5698	O	HIS	117	11.908	-34.113	-3.262	1.00	53.92
ATOM	5699	CB	HIS	117	10.486	-36.943	-3.057	1.00	61.50
ATOM	5700	CG	HIS	117	10.263	-38.421	-3.182	1.00	65.95
ATOM	5701	ND1	HIS	117	10.494	-39.115	-4.353	1.00	66.97
ATOM	5702	CD2	HIS	117	9.867	-39.344	-2.272	1.00	67.49
ATOM	5703	CE1	HIS	117	10.250	-40.400	-4.158	1.00	67.74
ATOM	5704	NE2	HIS	117	9.868	-40.565	-2.904	1.00	68.34
ATOM	5705	H	HIS	117	12.838	-37.918	-2.589	1.00	0.00
ATOM	5706	HD1	HIS	117	10.768	-38.712	-5.215	1.00	0.00
ATOM	5707	HE2	HIS	117	9.593	-41.405	-2.468	1.00	0.00
ATOM	5708	N	VAL	118	13.153	-35.422	-1.927	1.00	49.78
ATOM	5709	CA	VAL	118	13.701	-34.311	-1.171	1.00	47.22
ATOM	5710	C	VAL	118	15.192	-34.519	-0.950	1.00	46.21
ATOM	5711	O	VAL	118	15.595	-35.179	0.004	1.00	46.12
ATOM	5712	CB	VAL	118	13.017	-34.185	0.205	1.00	46.77
ATOM	5713	CG1	VAL	118	13.604	-33.014	0.981	1.00	47.74

ATOM	5714	CG2	VAL	118	11.528	-34.009	0.034	1.00	47.11
ATOM	5715	H	VAL	118	13.381	-36.322	-1.619	1.00	0.00
ATOM	5716	N	HIS	119	16.018	-33.979	-1.836	1.00	45.58
ATOM	5717	CA	HIS	119	17.453	-34.132	-1.669	1.00	45.66
ATOM	5718	C	HIS	119	18.275	-32.925	-2.072	1.00	45.32
ATOM	5719	O	HIS	119	17.886	-32.131	-2.928	1.00	45.78
ATOM	5720	CB	HIS	119	17.981	-35.410	-2.332	1.00	46.88
ATOM	5721	CG	HIS	119	17.685	-35.517	-3.795	1.00	47.79
ATOM	5722	ND1	HIS	119	16.636	-36.262	-4.286	1.00	48.22
ATOM	5723	CD2	HIS	119	18.325	-35.010	-4.877	1.00	48.49
ATOM	5724	CE1	HIS	119	16.639	-36.211	-5.606	1.00	48.59
ATOM	5725	NE2	HIS	119	17.653	-35.457	-5.989	1.00	49.25
ATOM	5726	H	HIS	119	15.661	-33.402	-2.546	1.00	0.00
ATOM	5727	HD1	HIS	119	16.021	-36.755	-3.698	1.00	0.00
ATOM	5728	HE2	HIS	119	17.881	-35.229	-6.917	1.00	0.00
ATOM	5729	N	THR	120	19.428	-32.820	-1.429	1.00	44.24
ATOM	5730	CA	THR	120	20.371	-31.734	-1.613	1.00	42.99
ATOM	5731	C	THR	120	20.920	-31.497	-3.014	1.00	42.36
ATOM	5732	O	THR	120	21.071	-32.427	-3.808	1.00	42.67
ATOM	5733	CB	THR	120	21.541	-31.917	-0.653	1.00	43.10
ATOM	5734	OG1	THR	120	22.169	-33.182	-0.903	1.00	42.92
ATOM	5735	CG2	THR	120	21.035	-31.905	0.778	1.00	43.47
ATOM	5736	H	THR	120	19.655	-33.502	-0.773	1.00	0.00
ATOM	5737	HG1	THR	120	21.540	-33.871	-1.102	1.00	0.00
ATOM	5738	N	VAL	121	21.204	-30.228	-3.296	1.00	41.98
ATOM	5739	CA	VAL	121	21.768	-29.795	-4.572	1.00	40.71
ATOM	5740	C	VAL	121	23.297	-29.761	-4.415	1.00	41.18
ATOM	5741	O	VAL	121	23.814	-29.571	-3.308	1.00	40.92
ATOM	5742	CB	VAL	121	21.239	-28.381	-4.968	1.00	37.68
ATOM	5743	CG1	VAL	121	21.656	-27.351	-3.942	1.00	35.72
ATOM	5744	CG2	VAL	121	21.730	-27.992	-6.343	1.00	35.33
ATOM	5745	H	VAL	121	21.008	-29.570	-2.596	1.00	0.00
ATOM	5746	N	THR	122	24.016	-29.965	-5.514	1.00	41.05
ATOM	5747	CA	THR	122	25.472	-29.957	-5.485	1.00	40.41
ATOM	5748	C	THR	122	26.008	-28.524	-5.583	1.00	39.50
ATOM	5749	O	THR	122	25.556	-27.741	-6.420	1.00	39.00
ATOM	5750	CB	THR	122	26.043	-30.800	-6.657	1.00	40.98
ATOM	5751	OG1	THR	122	25.380	-32.072	-6.699	1.00	41.12
ATOM	5752	CG2	THR	122	27.540	-31.027	-6.488	1.00	41.60
ATOM	5753	H	THR	122	23.600	-30.125	-6.386	1.00	0.00
ATOM	5754	HG1	THR	122	25.406	-32.477	-5.827	1.00	0.00
ATOM	5755	N	LEU	123	26.910	-28.155	-4.678	1.00	39.39
ATOM	5756	CA	LEU	123	27.504	-26.822	-4.714	1.00	40.23
ATOM	5757	C	LEU	123	28.630	-26.868	-5.742	1.00	42.40
ATOM	5758	O	LEU	123	29.346	-27.865	-5.833	1.00	44.09
ATOM	5759	CB	LEU	123	28.052	-26.421	-3.341	1.00	37.96
ATOM	5760	CG	LEU	123	27.009	-26.086	-2.277	1.00	35.34
ATOM	5761	CD1	LEU	123	27.701	-25.724	-0.968	1.00	33.66
ATOM	5762	CD2	LEU	123	26.133	-24.940	-2.768	1.00	34.28
ATOM	5763	H	LEU	123	27.188	-28.787	-3.984	1.00	0.00
ATOM	5764	N	PRO	124	28.797	-25.797	-6.532	1.00	43.59
ATOM	5765	CA	PRO	124	29.845	-25.751	-7.556	1.00	44.65
ATOM	5766	C	PRO	124	31.244	-25.806	-6.961	1.00	46.53
ATOM	5767	O	PRO	124	31.446	-25.467	-5.794	1.00	46.35
ATOM	5768	CB	PRO	124	29.611	-24.392	-8.227	1.00	43.56
ATOM	5769	CG	PRO	124	28.189	-24.090	-7.937	1.00	43.21
ATOM	5770	CD	PRO	124	28.051	-24.533	-6.511	1.00	43.13
ATOM	5771	N	PRO	125	32.221	-26.304	-7.739	1.00	48.34
ATOM	5772	CA	PRO	125	33.593	-26.372	-7.236	1.00	49.46
ATOM	5773	C	PRO	125	34.145	-24.959	-7.385	1.00	51.62
ATOM	5774	O	PRO	125	33.930	-24.314	-8.413	1.00	51.76
ATOM	5775	CB	PRO	125	34.260	-27.346	-8.206	1.00	48.62
ATOM	5776	CG	PRO	125	33.554	-27.066	-9.490	1.00	48.59

114/126

ATOM	5777	CD	PRO	125	32.109	-26.934	-9.068	1.00	48.35
ATOM	5778	N	ALA	126	34.835	-24.477	-6.358	1.00	53.46
ATOM	5779	CA	ALA	126	35.403	-23.129	-6.340	1.00	55.18
ATOM	5780	C	ALA	126	35.879	-22.583	-7.688	1.00	56.61
ATOM	5781	O	ALA	126	35.784	-21.381	-7.946	1.00	56.83
ATOM	5782	CB	ALA	126	36.534	-23.062	-5.316	1.00	55.44
ATOM	5783	H	ALA	126	34.940	-25.053	-5.575	1.00	0.00
ATOM	5784	N	SER	127	36.382	-23.472	-8.537	1.00	58.04
ATOM	5785	CA	SER	127	36.899	-23.095	-9.844	1.00	59.60
ATOM	5786	C	SER	127	35.860	-22.907	-10.952	1.00	59.72
ATOM	5787	O	SER	127	36.001	-22.006	-11.784	1.00	59.90
ATOM	5788	CB	SER	127	37.948	-24.121	-10.294	1.00	61.16
ATOM	5789	OG	SER	127	38.447	-23.838	-11.593	1.00	62.91
ATOM	5790	H	SER	127	36.406	-24.411	-8.294	1.00	0.00
ATOM	5791	HG	SER	127	39.189	-24.409	-11.804	1.00	0.00
ATOM	5792	N	GLU	128	34.818	-23.735	-10.958	1.00	59.72
ATOM	5793	CA	GLU	128	33.809	-23.660	-12.011	1.00	59.04
ATOM	5794	C	GLU	128	33.243	-22.269	-12.259	1.00	56.97
ATOM	5795	O	GLU	128	32.951	-21.512	-11.326	1.00	57.16
ATOM	5796	CB	GLU	128	32.668	-24.656	-11.776	1.00	60.16
ATOM	5797	CG	GLU	128	31.697	-24.793	-12.960	1.00	61.94
ATOM	5798	CD	GLU	128	32.367	-25.296	-14.238	1.00	62.83
ATOM	5799	OE1	GLU	128	32.175	-26.482	-14.587	1.00	63.13
ATOM	5800	OE2	GLU	128	33.082	-24.509	-14.894	1.00	63.33
ATOM	5801	H	GLU	128	34.671	-24.348	-10.221	1.00	0.00
ATOM	5802	N	THR	129	33.118	-21.943	-13.538	1.00	53.80
ATOM	5803	CA	THR	129	32.582	-20.671	-13.967	1.00	50.57
ATOM	5804	C	THR	129	31.364	-20.994	-14.820	1.00	48.22
ATOM	5805	O	THR	129	31.284	-22.064	-15.428	1.00	48.65
ATOM	5806	CB	THR	129	33.618	-19.875	-14.787	1.00	50.61
ATOM	5807	OG1	THR	129	33.061	-18.605	-15.153	1.00	50.73
ATOM	5808	CG2	THR	129	34.032	-20.640	-16.047	1.00	50.35
ATOM	5809	H	THR	129	33.330	-22.630	-14.214	1.00	0.00
ATOM	5810	HG1	THR	129	33.746	-17.950	-14.971	1.00	0.00
ATOM	5811	N	PHE	130	30.397	-20.088	-14.843	1.00	44.03
ATOM	5812	CA	PHE	130	29.196	-20.311	-15.627	1.00	40.01
ATOM	5813	C	PHE	130	29.147	-19.285	-16.745	1.00	40.47
ATOM	5814	O	PHE	130	28.598	-18.192	-16.587	1.00	40.48
ATOM	5815	CB	PHE	130	27.968	-20.245	-14.729	1.00	34.57
ATOM	5816	CG	PHE	130	28.014	-21.229	-13.612	1.00	29.00
ATOM	5817	CD1	PHE	130	28.561	-20.877	-12.388	1.00	27.62
ATOM	5818	CD2	PHE	130	27.577	-22.527	-13.801	1.00	26.57
ATOM	5819	CE1	PHE	130	28.682	-21.810	-11.366	1.00	26.04
ATOM	5820	CE2	PHE	130	27.694	-23.465	-12.787	1.00	26.00
ATOM	5821	CZ	PHE	130	28.249	-23.106	-11.566	1.00	25.15
ATOM	5822	H	PHE	130	30.518	-19.245	-14.371	1.00	0.00
ATOM	5823	N	PRO	131	29.785	-19.612	-17.878	1.00	40.90
ATOM	5824	CA	PRO	131	29.866	-18.772	-19.070	1.00	40.56
ATOM	5825	C	PRO	131	28.495	-18.495	-19.624	1.00	40.93
ATOM	5826	O	PRO	131	27.550	-19.250	-19.389	1.00	40.50
ATOM	5827	CB	PRO	131	30.660	-19.640	-20.044	1.00	41.58
ATOM	5828	CG	PRO	131	31.489	-20.487	-19.153	1.00	42.76
ATOM	5829	CD	PRO	131	30.487	-20.882	-18.110	1.00	41.43
ATOM	5830	N	PRO	132	28.362	-17.393	-20.366	1.00	42.09
ATOM	5831	CA	PRO	132	27.072	-17.041	-20.951	1.00	43.35
ATOM	5832	C	PRO	132	26.573	-18.184	-21.827	1.00	44.96
ATOM	5833	O	PRO	132	27.369	-18.963	-22.357	1.00	45.53
ATOM	5834	CB	PRO	132	27.412	-15.809	-21.779	1.00	42.68
ATOM	5835	CG	PRO	132	28.507	-15.165	-20.976	1.00	42.74
ATOM	5836	CD	PRO	132	29.367	-16.349	-20.628	1.00	42.36
ATOM	5837	N	GLY	133	25.255	-18.303	-21.941	1.00	46.46
ATOM	5838	CA	GLY	133	24.676	-19.352	-22.760	1.00	47.33
ATOM	5839	C	GLY	133	24.737	-20.731	-22.135	1.00	47.78

115/126

ATOM	5840	O	GLY	133	24.897	-21.729	-22.837	1.00	47.69
ATOM	5841	H	GLY	133	24.704	-17.646	-21.466	1.00	0.00
ATOM	5842	N	MET	134	24.608	-20.791	-20.816	1.00	48.51
ATOM	5843	CA	MET	134	24.625	-22.067	-20.110	1.00	48.72
ATOM	5844	C	MET	134	23.191	-22.373	-19.640	1.00	48.89
ATOM	5845	O	MET	134	22.452	-21.461	-19.236	1.00	48.99
ATOM	5846	CB	MET	134	25.591	-22.002	-18.921	1.00	47.99
ATOM	5847	CG	MET	134	25.892	-23.340	-18.279	1.00	47.43
ATOM	5848	SD	MET	134	27.053	-23.199	-16.914	1.00	49.72
ATOM	5849	CE	MET	134	28.548	-23.664	-17.723	1.00	49.32
ATOM	5850	H	MET	134	24.498	-19.978	-20.291	1.00	0.00
ATOM	5851	N	PRO	135	22.761	-23.647	-19.749	1.00	48.26
ATOM	5852	CA	PRO	135	21.417	-24.074	-19.339	1.00	45.81
ATOM	5853	C	PRO	135	21.195	-23.868	-17.846	1.00	42.66
ATOM	5854	O	PRO	135	21.483	-24.751	-17.030	1.00	42.66
ATOM	5855	CB	PRO	135	21.403	-25.560	-19.712	1.00	46.98
ATOM	5856	CG	PRO	135	22.848	-25.962	-19.576	1.00	47.30
ATOM	5857	CD	PRO	135	23.539	-24.799	-20.245	1.00	48.97
ATOM	5858	N	CYS	136	20.720	-22.684	-17.492	1.00	38.45
ATOM	5859	CA	CYS	136	20.476	-22.372	-16.104	1.00	35.63
ATOM	5860	C	CYS	136	19.000	-22.143	-15.849	1.00	33.86
ATOM	5861	O	CYS	136	18.270	-21.663	-16.716	1.00	32.99
ATOM	5862	CB	CYS	136	21.314	-21.173	-15.696	1.00	34.89
ATOM	5863	SG	CYS	136	23.091	-21.482	-15.932	1.00	35.41
ATOM	5864	H	CYS	136	20.545	-21.978	-18.151	1.00	0.00
ATOM	5865	N	TRP	137	18.556	-22.537	-14.665	1.00	31.87
ATOM	5866	CA	TRP	137	17.166	-22.397	-14.295	1.00	31.35
ATOM	5867	C	TRP	137	17.006	-21.877	-12.887	1.00	31.64
ATOM	5868	O	TRP	137	17.790	-22.218	-11.999	1.00	32.59
ATOM	5869	CB	TRP	137	16.478	-23.752	-14.353	1.00	32.22
ATOM	5870	CG	TRP	137	16.346	-24.327	-15.700	1.00	32.31
ATOM	5871	CD1	TRP	137	17.334	-24.876	-16.457	1.00	32.28
ATOM	5872	CD2	TRP	137	15.132	-24.491	-16.433	1.00	32.79
ATOM	5873	NE1	TRP	137	16.809	-25.385	-17.617	1.00	33.38
ATOM	5874	CE2	TRP	137	15.456	-25.163	-17.629	1.00	33.14
ATOM	5875	CE3	TRP	137	13.796	-24.143	-16.191	1.00	33.80
ATOM	5876	CZ2	TRP	137	14.492	-25.497	-18.587	1.00	34.85
ATOM	5877	CZ3	TRP	137	12.834	-24.475	-17.145	1.00	35.45
ATOM	5878	CH2	TRP	137	13.189	-25.146	-18.330	1.00	35.55
ATOM	5879	H	TRP	137	19.178	-22.948	-14.032	1.00	0.00
ATOM	5880	HE1	TRP	137	17.333	-25.845	-18.304	1.00	0.00
ATOM	5881	N	VAL	138	15.971	-21.064	-12.693	1.00	31.34
ATOM	5882	CA	VAL	138	15.631	-20.511	-11.384	1.00	31.07
ATOM	5883	C	VAL	138	14.219	-21.012	-11.098	1.00	30.96
ATOM	5884	O	VAL	138	13.423	-21.202	-12.030	1.00	31.00
ATOM	5885	CB	VAL	138	15.663	-18.958	-11.347	1.00	30.99
ATOM	5886	CG1	VAL	138	17.088	-18.458	-11.387	1.00	32.21
ATOM	5887	CG2	VAL	138	14.895	-18.379	-12.505	1.00	32.19
ATOM	5888	H	VAL	138	15.405	-20.881	-13.475	1.00	0.00
ATOM	5889	N	THR	139	13.927	-21.271	-9.827	1.00	29.92
ATOM	5890	CA	THR	139	12.620	-21.779	-9.422	1.00	29.41
ATOM	5891	C	THR	139	12.161	-21.166	-8.097	1.00	29.36
ATOM	5892	O	THR	139	12.985	-20.914	-7.207	1.00	30.92
ATOM	5893	CB	THR	139	12.646	-23.326	-9.287	1.00	29.70
ATOM	5894	OG1	THR	139	13.722	-23.724	-8.421	1.00	30.69
ATOM	5895	CG2	THR	139	12.853	-23.975	-10.640	1.00	28.79
ATOM	5896	H	THR	139	14.619	-21.111	-9.150	1.00	0.00
ATOM	5897	HG1	THR	139	13.914	-22.990	-7.822	1.00	0.00
ATOM	5898	N	GLY	140	10.856	-20.950	-7.956	1.00	26.95
ATOM	5899	CA	GLY	140	10.336	-20.372	-6.729	1.00	25.57
ATOM	5900	C	GLY	140	8.842	-20.154	-6.781	1.00	24.27
ATOM	5901	O	GLY	140	8.189	-20.574	-7.732	1.00	25.57
ATOM	5902	H	GLY	140	10.227	-21.181	-8.680	1.00	0.00

116/126

ATOM	5903	N	TRP	141	8.295	-19.534	-5.740	1.00	22.20
ATOM	5904	CA	TRP	141	6.865	-19.248	-5.665	1.00	20.99
ATOM	5905	C	TRP	141	6.623	-17.737	-5.642	1.00	21.65
ATOM	5906	O	TRP	141	5.714	-17.256	-4.948	1.00	23.36
ATOM	5907	CB	TRP	141	6.282	-19.821	-4.380	1.00	19.03
ATOM	5908	CG	TRP	141	6.102	-21.283	-4.345	1.00	18.34
ATOM	5909	CD1	TRP	141	5.003	-21.980	-4.759	1.00	18.69
ATOM	5910	CD2	TRP	141	6.975	-22.235	-3.735	1.00	17.69
ATOM	5911	NE1	TRP	141	5.130	-23.302	-4.425	1.00	18.32
ATOM	5912	CE2	TRP	141	6.333	-23.487	-3.794	1.00	18.19
ATOM	5913	CE3	TRP	141	8.233	-22.149	-3.128	1.00	16.74
ATOM	5914	CZ2	TRP	141	6.908	-24.644	-3.267	1.00	17.70
ATOM	5915	CZ3	TRP	141	8.801	-23.298	-2.604	1.00	15.78
ATOM	5916	CH2	TRP	141	8.138	-24.528	-2.676	1.00	16.93
ATOM	5917	H	TRP	141	8.899	-19.228	-5.036	1.00	0.00
ATOM	5918	HE1	TRP	141	4.448	-23.975	-4.652	1.00	0.00
ATOM	5919	N	GLY	142	7.441	-16.986	-6.369	1.00	19.98
ATOM	5920	CA	GLY	142	7.299	-15.544	-6.368	1.00	18.55
ATOM	5921	C	GLY	142	6.288	-14.924	-7.306	1.00	18.04
ATOM	5922	O	GLY	142	5.475	-15.607	-7.930	1.00	16.94
ATOM	5923	H	GLY	142	8.167	-17.369	-6.913	1.00	0.00
ATOM	5924	N	ASP	143	6.314	-13.598	-7.347	1.00	19.03
ATOM	5925	CA	ASP	143	5.433	-12.835	-8.208	1.00	21.24
ATOM	5926	C	ASP	143	5.745	-13.248	-9.624	1.00	22.79
ATOM	5927	O	ASP	143	6.909	-13.422	-9.990	1.00	23.16
ATOM	5928	CB	ASP	143	5.686	-11.334	-8.057	1.00	21.71
ATOM	5929	CG	ASP	143	5.148	-10.769	-6.751	1.00	23.33
ATOM	5930	OD1	ASP	143	4.618	-11.540	-5.913	1.00	23.76
ATOM	5931	OD2	ASP	143	5.258	-9.535	-6.565	1.00	23.38
ATOM	5932	H	ASP	143	6.930	-13.138	-6.757	1.00	0.00
ATOM	5933	N	VAL	144	4.699	-13.391	-10.421	1.00	24.07
ATOM	5934	CA	VAL	144	4.854	-13.782	-11.807	1.00	25.12
ATOM	5935	C	VAL	144	4.991	-12.545	-12.688	1.00	27.21
ATOM	5936	O	VAL	144	5.038	-12.644	-13.915	1.00	27.06
ATOM	5937	CB	VAL	144	3.685	-14.640	-12.247	1.00	23.86
ATOM	5938	CG1	VAL	144	3.616	-15.889	-11.373	1.00	23.15
ATOM	5939	CG2	VAL	144	2.401	-13.844	-12.146	1.00	24.15
ATOM	5940	H	VAL	144	3.838	-13.140	-10.028	1.00	0.00
ATOM	5941	N	ASP	145	5.038	-11.389	-12.032	1.00	30.21
ATOM	5942	CA	ASP	145	5.208	-10.084	-12.662	1.00	32.95
ATOM	5943	C	ASP	145	5.186	-9.056	-11.532	1.00	33.80
ATOM	5944	O	ASP	145	4.771	-9.360	-10.407	1.00	34.03
ATOM	5945	CB	ASP	145	4.089	-9.794	-13.667	1.00	35.68
ATOM	5946	CG	ASP	145	4.501	-8.777	-14.733	1.00	40.39
ATOM	5947	OD1	ASP	145	5.163	-7.773	-14.397	1.00	41.50
ATOM	5948	OD2	ASP	145	4.176	-8.983	-15.923	1.00	43.13
ATOM	5949	H	ASP	145	4.923	-11.365	-11.060	1.00	0.00
ATOM	5950	N	ASN	146	5.692	-7.863	-11.800	1.00	35.25
ATOM	5951	CA	ASN	146	5.707	-6.808	-10.800	1.00	37.85
ATOM	5952	C	ASN	146	4.263	-6.542	-10.371	1.00	39.69
ATOM	5953	O	ASN	146	3.368	-6.411	-11.211	1.00	38.91
ATOM	5954	CB	ASN	146	6.327	-5.527	-11.377	1.00	38.72
ATOM	5955	CG	ASN	146	7.818	-5.665	-11.688	1.00	39.84
ATOM	5956	OD1	ASN	146	8.274	-6.678	-12.215	1.00	39.84
ATOM	5957	ND2	ASN	146	8.582	-4.630	-11.363	1.00	40.72
ATOM	5958	H	ASN	146	6.039	-7.698	-12.700	1.00	0.00
ATOM	5959	HD21	ASN	146	8.150	-3.870	-10.922	1.00	0.00
ATOM	5960	HD22	ASN	146	9.531	-4.627	-11.582	1.00	0.00
ATOM	5961	N	ASP	147	4.041	-6.510	-9.061	1.00	42.92
ATOM	5962	CA	ASP	147	2.720	-6.271	-8.481	1.00	45.50
ATOM	5963	C	ASP	147	1.678	-7.310	-8.888	1.00	45.08
ATOM	5964	O	ASP	147	0.491	-7.005	-9.009	1.00	45.63
ATOM	5965	CB	ASP	147	2.224	-4.854	-8.801	1.00	49.17

117/176

ATOM	5966	CG	ASP	147	3.135	-3.776	-8.242	1.00	51.28
ATOM	5967	OD1	ASP	147	3.564	-3.892	-7.069	1.00	51.76
ATOM	5968	OD2	ASP	147	3.432	-2.814	-8.983	1.00	52.33
ATOM	5969	H	ASP	147	4.782	-6.628	-8.446	1.00	0.00
ATOM	5970	N	GLU	149	2.132	-8.549	-9.050	1.00	44.34
ATOM	5971	CA	GLU	149	1.274	-9.668	-9.422	1.00	44.10
ATOM	5972	C	GLU	149	1.644	-10.870	-8.552	1.00	44.12
ATOM	5973	O	GLU	149	2.603	-11.588	-8.862	1.00	45.54
ATOM	5974	CB	GLU	149	1.485	-10.021	-10.895	1.00	44.59
ATOM	5975	CG	GLU	149	0.598	-9.275	-11.856	1.00	45.44
ATOM	5976	CD	GLU	149	-0.686	-10.014	-12.112	1.00	46.55
ATOM	5977	OE1	GLU	149	-1.673	-9.754	-11.396	1.00	47.85
ATOM	5978	OE2	GLU	149	-0.705	-10.864	-13.028	1.00	47.49
ATOM	5979	H	GLU	149	3.092	-8.734	-8.946	1.00	0.00
ATOM	5980	N	ARG	150	0.898	-11.083	-7.469	1.00	42.34
ATOM	5981	CA	ARG	150	1.173	-12.192	-6.562	1.00	40.58
ATOM	5982	C	ARG	150	0.909	-13.510	-7.271	1.00	36.71
ATOM	5983	O	ARG	150	0.113	-13.567	-8.202	1.00	35.51
ATOM	5984	CB	ARG	150	0.299	-12.076	-5.298	1.00	44.36
ATOM	5985	CG	ARG	150	0.983	-12.449	-3.958	1.00	49.52
ATOM	5986	CD	ARG	150	0.705	-13.891	-3.461	1.00	52.52
ATOM	5987	NE	ARG	150	1.800	-14.823	-3.749	1.00	56.25
ATOM	5988	CZ	ARG	150	2.116	-15.884	-3.004	1.00	57.81
ATOM	5989	NH1	ARG	150	1.418	-16.165	-1.904	1.00	58.65
ATOM	5990	NH2	ARG	150	3.149	-16.654	-3.345	1.00	58.09
ATOM	5991	H	ARG	150	0.136	-10.505	-7.318	1.00	0.00
ATOM	5992	HE	ARG	150	2.358	-14.637	-4.544	1.00	0.00
ATOM	5993	HH11	ARG	150	0.638	-15.589	-1.639	1.00	0.00
ATOM	5994	HH12	ARG	150	1.629	-16.941	-1.289	1.00	0.00
ATOM	5995	HH21	ARG	150	3.733	-16.457	-4.142	1.00	0.00
ATOM	5996	HH22	ARG	150	3.419	-17.458	-2.818	1.00	0.00
ATOM	5997	N	LEU	151	1.612	-14.558	-6.864	1.00	33.64
ATOM	5998	CA	LEU	151	1.437	-15.887	-7.439	1.00	31.59
ATOM	5999	C	LEU	151	0.033	-16.344	-7.041	1.00	31.86
ATOM	6000	O	LEU	151	-0.236	-16.555	-5.857	1.00	33.16
ATOM	6001	CB	LEU	151	2.468	-16.854	-6.853	1.00	28.75
ATOM	6002	CG	LEU	151	2.340	-18.312	-7.296	1.00	27.73
ATOM	6003	CD1	LEU	151	2.701	-18.464	-8.770	1.00	26.76
ATOM	6004	CD2	LEU	151	3.235	-19.164	-6.431	1.00	26.77
ATOM	6005	H	LEU	151	2.315	-14.446	-6.184	1.00	0.00
ATOM	6006	N	PRO	152	-0.866	-16.531	-8.023	1.00	31.21
ATOM	6007	CA	PRO	152	-2.248	-16.957	-7.774	1.00	30.53
ATOM	6008	C	PRO	152	-2.375	-18.369	-7.228	1.00	30.09
ATOM	6009	O	PRO	152	-1.578	-19.254	-7.555	1.00	30.99
ATOM	6010	CB	PRO	152	-2.890	-16.883	-9.162	1.00	30.77
ATOM	6011	CG	PRO	152	-1.984	-15.982	-9.942	1.00	31.82
ATOM	6012	CD	PRO	152	-0.632	-16.410	-9.464	1.00	31.49
ATOM	6013	N	PRO	152A	-3.389	-18.600	-6.387	1.00	28.14
ATOM	6014	CA	PRO	152A	-3.665	-19.901	-5.773	1.00	27.11
ATOM	6015	C	PRO	152A	-3.922	-20.895	-6.891	1.00	25.31
ATOM	6016	O	PRO	152A	-4.539	-20.534	-7.892	1.00	24.42
ATOM	6017	CB	PRO	152A	-4.944	-19.627	-4.993	1.00	27.02
ATOM	6018	CG	PRO	152A	-4.795	-18.202	-4.600	1.00	27.30
ATOM	6019	CD	PRO	152A	-4.319	-17.580	-5.883	1.00	28.07
ATOM	6020	N	PRO	152B	-3.446	-22.149	-6.756	1.00	24.63
ATOM	6021	CA	PRO	152B	-2.955	-22.907	-5.600	1.00	24.72
ATOM	6022	C	PRO	152B	-1.463	-22.757	-5.251	1.00	25.47
ATOM	6023	O	PRO	152B	-0.897	-23.628	-4.580	1.00	26.39
ATOM	6024	CB	PRO	152B	-3.245	-24.338	-6.021	1.00	24.31
ATOM	6025	CG	PRO	152B	-2.897	-24.313	-7.448	1.00	23.77
ATOM	6026	CD	PRO	152B	-3.581	-23.048	-7.919	1.00	25.10
ATOM	6027	N	PHE	153	-0.821	-21.697	-5.745	1.00	24.43
ATOM	6028	CA	PHE	153	0.596	-21.418	-5.486	1.00	22.49

118/176

ATOM	6029	C	PHE	153	1.542	-22.546	-5.917	1.00	22.52
ATOM	6030	O	PHE	153	2.274	-23.118	-5.098	1.00	23.36
ATOM	6031	CB	PHE	153	0.815	-21.105	-4.009	1.00	19.70
ATOM	6032	CG	PHE	153	-0.229	-20.218	-3.425	1.00	19.12
ATOM	6033	CD1	PHE	153	-1.208	-20.739	-2.592	1.00	18.41
ATOM	6034	CD2	PHE	153	-0.230	-18.857	-3.691	1.00	19.19
ATOM	6035	CE1	PHE	153	-2.169	-19.923	-2.031	1.00	18.36
ATOM	6036	CE2	PHE	153	-1.189	-18.027	-3.133	1.00	18.48
ATOM	6037	CZ	PHE	153	-2.159	-18.559	-2.303	1.00	18.33
ATOM	6038	H	PHE	153	-1.258	-21.053	-6.341	1.00	0.00
ATOM	6039	N	PRO	154	1.539	-22.877	-7.213	1.00	21.19
ATOM	6040	CA	PRO	154	2.399	-23.938	-7.737	1.00	20.90
ATOM	6041	C	PRO	154	3.838	-23.468	-7.807	1.00	21.87
ATOM	6042	O	PRO	154	4.105	-22.268	-7.820	1.00	23.46
ATOM	6043	CB	PRO	154	1.843	-24.145	-9.134	1.00	20.95
ATOM	6044	CG	PRO	154	1.490	-22.747	-9.541	1.00	21.55
ATOM	6045	CD	PRO	154	0.808	-22.206	-8.304	1.00	20.85
ATOM	6046	N	LEU	155	4.767	-24.409	-7.845	1.00	22.18
ATOM	6047	CA	LEU	155	6.182	-24.060	-7.947	1.00	21.41
ATOM	6048	C	LEU	155	6.453	-23.788	-9.418	1.00	21.00
ATOM	6049	O	LEU	155	6.141	-24.614	-10.272	1.00	21.98
ATOM	6050	CB	LEU	155	7.054	-25.227	-7.482	1.00	19.20
ATOM	6051	CG	LEU	155	8.568	-25.064	-7.538	1.00	16.60
ATOM	6052	CD1	LEU	155	9.046	-24.292	-6.331	1.00	17.48
ATOM	6053	CD2	LEU	155	9.206	-26.430	-7.551	1.00	17.11
ATOM	6054	H	LEU	155	4.496	-25.345	-7.794	1.00	0.00
ATOM	6055	N	LYS	156	6.995	-22.624	-9.730	1.00	20.69
ATOM	6056	CA	LYS	156	7.289	-22.314	-11.115	1.00	20.73
ATOM	6057	C	LYS	156	8.772	-22.479	-11.371	1.00	20.75
ATOM	6058	O	LYS	156	9.570	-22.526	-10.437	1.00	21.16
ATOM	6059	CB	LYS	156	6.851	-20.896	-11.460	1.00	21.65
ATOM	6060	CG	LYS	156	5.351	-20.679	-11.375	1.00	23.13
ATOM	6061	CD	LYS	156	4.960	-19.436	-12.144	1.00	24.97
ATOM	6062	CE	LYS	156	5.312	-19.587	-13.618	1.00	25.65
ATOM	6063	NZ	LYS	156	5.198	-18.307	-14.370	1.00	27.51
ATOM	6064	H	LYS	156	7.236	-21.974	-9.036	1.00	0.00
ATOM	6065	HZ1	LYS	156	5.837	-17.594	-13.939	1.00	0.00
ATOM	6066	HZ2	LYS	156	4.221	-17.961	-14.330	1.00	0.00
ATOM	6067	HZ3	LYS	156	5.463	-18.515	-15.364	1.00	0.00
ATOM	6068	N	GLN	157	9.134	-22.561	-12.640	1.00	21.24
ATOM	6069	CA	GLN	157	10.519	-22.717	-13.044	1.00	22.24
ATOM	6070	C	GLN	157	10.708	-21.973	-14.354	1.00	24.17
ATOM	6071	O	GLN	157	9.763	-21.840	-15.133	1.00	24.32
ATOM	6072	CB	GLN	157	10.818	-24.191	-13.277	1.00	21.80
ATOM	6073	CG	GLN	157	9.846	-24.834	-14.247	1.00	22.41
ATOM	6074	CD	GLN	157	10.306	-26.182	-14.742	1.00	23.03
ATOM	6075	OE1	GLN	157	11.101	-26.862	-14.098	1.00	22.47
ATOM	6076	NE2	GLN	157	9.805	-26.578	-15.898	1.00	24.40
ATOM	6077	H	GLN	157	8.438	-22.525	-13.322	1.00	0.00
ATOM	6078	HE21	GLN	157	9.159	-25.994	-16.343	1.00	0.00
ATOM	6079	HE22	GLN	157	10.089	-27.439	-16.258	1.00	0.00
ATOM	6080	N	VAL	158	11.914	-21.483	-14.600	1.00	25.41
ATOM	6081	CA	VAL	158	12.192	-20.794	-15.848	1.00	26.28
ATOM	6082	C	VAL	158	13.671	-20.886	-16.201	1.00	27.79
ATOM	6083	O	VAL	158	14.521	-20.919	-15.310	1.00	27.83
ATOM	6084	CB	VAL	158	11.734	-19.331	-15.804	1.00	26.15
ATOM	6085	CG1	VAL	158	12.481	-18.567	-14.743	1.00	27.07
ATOM	6086	CG2	VAL	158	11.910	-18.693	-17.163	1.00	26.67
ATOM	6087	H	VAL	158	12.603	-21.547	-13.901	1.00	0.00
ATOM	6088	N	LYS	159	13.956	-21.018	-17.499	1.00	29.34
ATOM	6089	CA	LYS	159	15.324	-21.122	-18.003	1.00	29.35
ATOM	6090	C	LYS	159	15.870	-19.733	-18.241	1.00	29.03
ATOM	6091	O	LYS	159	15.325	-18.968	-19.042	1.00	29.33

119/126

ATOM	6092	CB	LYS	159	15.380	-21.920	-19.312	1.00	30.80
ATOM	6093	CG	LYS	159	16.769	-21.929	-19.963	1.00	33.80
ATOM	6094	CD	LYS	159	16.998	-23.100	-20.938	1.00	35.63
ATOM	6095	CE	LYS	159	16.409	-22.874	-22.336	1.00	37.43
ATOM	6096	NZ	LYS	159	14.922	-23.033	-22.420	1.00	38.90
ATOM	6097	H	LYS	159	13.213	-21.008	-18.129	1.00	0.00
ATOM	6098	HZ1	LYS	159	14.443	-22.365	-21.787	1.00	0.00
ATOM	6099	HZ2	LYS	159	14.661	-24.004	-22.157	1.00	0.00
ATOM	6100	HZ3	LYS	159	14.616	-22.857	-23.400	1.00	0.00
ATOM	6101	N	VAL	160	16.979	-19.427	-17.586	1.00	28.27
ATOM	6102	CA	VAL	160	17.584	-18.118	-17.717	1.00	27.22
ATOM	6103	C	VAL	160	18.995	-18.138	-18.300	1.00	26.89
ATOM	6104	O	VAL	160	19.783	-19.056	-18.042	1.00	26.21
ATOM	6105	CB	VAL	160	17.579	-17.352	-16.365	1.00	26.37
ATOM	6106	CG1	VAL	160	16.152	-17.061	-15.937	1.00	25.49
ATOM	6107	CG2	VAL	160	18.309	-18.145	-15.285	1.00	25.91
ATOM	6108	H	VAL	160	17.425	-20.106	-17.051	1.00	0.00
ATOM	6109	N	PRO	161	19.289	-17.165	-19.177	1.00	26.61
ATOM	6110	CA	PRO	161	20.592	-17.028	-19.824	1.00	26.53
ATOM	6111	C	PRO	161	21.541	-16.258	-18.912	1.00	27.45
ATOM	6112	O	PRO	161	21.225	-15.153	-18.465	1.00	28.05
ATOM	6113	CB	PRO	161	20.255	-16.212	-21.069	1.00	26.69
ATOM	6114	CG	PRO	161	19.180	-15.299	-20.582	1.00	24.96
ATOM	6115	CD	PRO	161	18.309	-16.234	-19.774	1.00	26.06
ATOM	6116	N	ILE	162	22.665	-16.864	-18.570	1.00	27.75
ATOM	6117	CA	ILE	162	23.630	-16.184	-17.729	1.00	27.79
ATOM	6118	C	ILE	162	24.371	-15.185	-18.607	1.00	29.32
ATOM	6119	O	ILE	162	24.574	-15.444	-19.795	1.00	29.91
ATOM	6120	CB	ILE	162	24.619	-17.179	-17.128	1.00	27.56
ATOM	6121	CG1	ILE	162	23.909	-18.033	-16.087	1.00	28.94
ATOM	6122	CG2	ILE	162	25.797	-16.461	-16.504	1.00	28.96
ATOM	6123	H	ILE	162	22.834	-17.778	-18.867	1.00	0.00
ATOM	6124	CD	ILE	162	24.851	-18.804	-15.197	1.00	30.81
ATOM	6125	N	MET	163	24.695	-14.017	-18.062	1.00	30.79
ATOM	6126	CA	MET	163	25.442	-13.025	-18.831	1.00	32.65
ATOM	6127	C	MET	163	26.647	-12.474	-18.075	1.00	33.28
ATOM	6128	O	MET	163	26.630	-12.329	-16.848	1.00	33.19
ATOM	6129	CB	MET	163	24.548	-11.900	-19.361	1.00	33.77
ATOM	6130	CG	MET	163	24.097	-10.861	-18.360	1.00	34.64
ATOM	6131	SD	MET	163	23.301	-9.518	-19.261	1.00	35.59
ATOM	6132	CE	MET	163	21.836	-10.392	-19.907	1.00	36.49
ATOM	6133	H	MET	163	24.435	-13.850	-17.131	1.00	0.00
ATOM	6134	N	GLU	164	27.700	-12.190	-18.834	1.00	34.37
ATOM	6135	CA	GLU	164	28.962	-11.699	-18.299	1.00	34.87
ATOM	6136	C	GLU	164	28.812	-10.420	-17.481	1.00	33.17
ATOM	6137	O	GLU	164	28.137	-9.478	-17.898	1.00	33.20
ATOM	6138	CB	GLU	164	29.955	-11.513	-19.451	1.00	37.78
ATOM	6139	CG	GLU	164	31.407	-11.771	-19.083	1.00	42.81
ATOM	6140	CD	GLU	164	32.102	-10.534	-18.541	1.00	46.15
ATOM	6141	OE1	GLU	164	32.348	-10.453	-17.314	1.00	47.13
ATOM	6142	OE2	GLU	164	32.398	-9.627	-19.349	1.00	47.50
ATOM	6143	H	GLU	164	27.612	-12.290	-19.799	1.00	0.00
ATOM	6144	N	ASN	165	29.470	-10.397	-16.324	1.00	31.91
ATOM	6145	CA	ASN	165	29.433	-9.268	-15.392	1.00	30.92
ATOM	6146	C	ASN	165	29.581	-7.912	-16.060	1.00	31.33
ATOM	6147	O	ASN	165	28.853	-6.976	-15.752	1.00	31.17
ATOM	6148	CB	ASN	165	30.531	-9.407	-14.329	1.00	29.99
ATOM	6149	CG	ASN	165	30.052	-10.101	-13.060	1.00	29.08
ATOM	6150	OD1	ASN	165	29.608	-11.253	-13.084	1.00	28.43
ATOM	6151	ND2	ASN	165	30.182	-9.413	-11.937	1.00	29.03
ATOM	6152	H	ASN	165	30.041	-11.168	-16.122	1.00	0.00
ATOM	6153	HD21	ASN	165	30.572	-8.511	-11.948	1.00	0.00
ATOM	6154	HD22	ASN	165	29.867	-9.826	-11.110	1.00	0.00

ATOM	6155	N	HIS	166	30.518	-7.807	-16.989	1.00	32.40
ATOM	6156	CA	HIS	166	30.757	-6.544	-17.665	1.00	33.70
ATOM	6157	C	HIS	166	29.581	-6.105	-18.522	1.00	32.64
ATOM	6158	O	HIS	166	29.161	-4.954	-18.449	1.00	33.42
ATOM	6159	CB	HIS	166	32.064	-6.628	-18.430	1.00	38.28
ATOM	6160	CG	HIS	166	33.186	-7.156	-17.591	1.00	45.08
ATOM	6161	ND1	HIS	166	34.050	-8.139	-18.024	1.00	48.15
ATOM	6162	CD2	HIS	166	33.531	-6.895	-16.306	1.00	46.84
ATOM	6163	CE1	HIS	166	34.874	-8.465	-17.043	1.00	49.33
ATOM	6164	NE2	HIS	166	34.580	-7.725	-15.989	1.00	48.48
ATOM	6165	H	HIS	166	31.034	-8.615	-17.227	1.00	0.00
ATOM	6166	HD1	HIS	166	33.982	-8.621	-18.884	1.00	0.00
ATOM	6167	HE2	HIS	166	35.036	-7.774	-15.124	1.00	0.00
ATOM	6168	N	ILE	167	29.003	-7.030	-19.275	1.00	30.67
ATOM	6169	CA	ILE	167	27.840	-6.715	-20.098	1.00	29.12
ATOM	6170	C	ILE	167	26.733	-6.249	-19.146	1.00	28.75
ATOM	6171	O	ILE	167	26.059	-5.245	-19.381	1.00	29.01
ATOM	6172	CB	ILE	167	27.350	-7.973	-20.872	1.00	28.84
ATOM	6173	CG1	ILE	167	28.319	-8.313	-21.999	1.00	27.30
ATOM	6174	CG2	ILE	167	25.958	-7.753	-21.448	1.00	28.44
ATOM	6175	H	ILE	167	29.360	-7.946	-19.276	1.00	0.00
ATOM	6176	CD	ILE	167	28.337	-7.284	-23.094	1.00	27.99
ATOM	6177	N	CYS	168	26.589	-6.975	-18.046	1.00	28.45
ATOM	6178	CA	CYS	168	25.581	-6.687	-17.036	1.00	29.22
ATOM	6179	C	CYS	168	25.718	-5.303	-16.399	1.00	30.84
ATOM	6180	O	CYS	168	24.728	-4.577	-16.260	1.00	32.38
ATOM	6181	CB	CYS	168	25.636	-7.758	-15.957	1.00	28.37
ATOM	6182	SG	CYS	168	24.312	-7.650	-14.729	1.00	26.91
ATOM	6183	H	CYS	168	27.165	-7.760	-17.930	1.00	0.00
ATOM	6184	N	ASP	169	26.938	-4.949	-16.001	1.00	30.44
ATOM	6185	CA	ASP	169	27.228	-3.655	-15.383	1.00	28.55
ATOM	6186	C	ASP	169	26.885	-2.528	-16.361	1.00	27.27
ATOM	6187	O	ASP	169	26.285	-1.526	-15.979	1.00	26.35
ATOM	6188	CB	ASP	169	28.708	-3.599	-14.996	1.00	30.58
ATOM	6189	CG	ASP	169	29.033	-2.449	-14.060	1.00	32.32
ATOM	6190	OD1	ASP	169	28.561	-2.462	-12.904	1.00	33.26
ATOM	6191	OD2	ASP	169	29.796	-1.544	-14.464	1.00	32.34
ATOM	6192	H	ASP	169	27.671	-5.581	-16.083	1.00	0.00
ATOM	6193	N	ALA	170	27.248	-2.709	-17.630	1.00	26.35
ATOM	6194	CA	ALA	170	26.956	-1.722	-18.665	1.00	25.15
ATOM	6195	C	ALA	170	25.455	-1.511	-18.703	1.00	23.75
ATOM	6196	O	ALA	170	24.973	-0.384	-18.631	1.00	24.34
ATOM	6197	CB	ALA	170	27.445	-2.208	-20.014	1.00	26.07
ATOM	6198	H	ALA	170	27.761	-3.514	-17.857	1.00	0.00
ATOM	6199	N	LYS	171	24.725	-2.611	-18.797	1.00	22.46
ATOM	6200	CA	LYS	171	23.273	-2.575	-18.816	1.00	22.07
ATOM	6201	C	LYS	171	22.772	-1.712	-17.663	1.00	20.74
ATOM	6202	O	LYS	171	22.021	-0.762	-17.870	1.00	20.15
ATOM	6203	CB	LYS	171	22.721	-3.983	-18.634	1.00	23.88
ATOM	6204	CG	LYS	171	23.183	-4.966	-19.665	1.00	24.76
ATOM	6205	CD	LYS	171	22.430	-4.771	-20.949	1.00	27.86
ATOM	6206	CE	LYS	171	22.424	-6.060	-21.746	1.00	31.18
ATOM	6207	NZ	LYS	171	21.977	-7.227	-20.908	1.00	32.72
ATOM	6208	H	LYS	171	25.193	-3.465	-18.876	1.00	0.00
ATOM	6209	HZ1	LYS	171	21.027	-7.074	-20.525	1.00	0.00
ATOM	6210	HZ2	LYS	171	22.649	-7.380	-20.128	1.00	0.00
ATOM	6211	HZ3	LYS	171	21.969	-8.081	-21.504	1.00	0.00
ATOM	6212	N	TYR	172	23.220	-2.035	-16.454	1.00	19.02
ATOM	6213	CA	TYR	172	22.816	-1.301	-15.266	1.00	17.28
ATOM	6214	C	TYR	172	23.127	0.195	-15.299	1.00	17.38
ATOM	6215	O	TYR	172	22.454	0.982	-14.630	1.00	18.78
ATOM	6216	CB	TYR	172	23.362	-1.969	-13.998	1.00	15.58
ATOM	6217	CG	TYR	172	22.363	-2.927	-13.395	1.00	16.07

ATOM	6218	CD1	TYR	172	22.124	-4.172	-13.976	1.00	16.89
ATOM	6219	CD2	TYR	172	21.570	-2.548	-12.311	1.00	16.35
ATOM	6220	CE1	TYR	172	21.108	-5.013	-13.498	1.00	15.96
ATOM	6221	CE2	TYR	172	20.552	-3.381	-11.829	1.00	15.73
ATOM	6222	CZ	TYR	172	20.328	-4.607	-12.431	1.00	15.06
ATOM	6223	OH	TYR	172	19.309	-5.411	-11.985	1.00	14.10
ATOM	6224	H	TYR	172	23.820	-2.807	-16.363	1.00	0.00
ATOM	6225	HH	TYR	172	19.348	-6.256	-12.442	1.00	0.00
ATOM	6226	N	HIS	173	24.110	0.596	-16.100	1.00	16.05
ATOM	6227	CA	HIS	173	24.460	2.013	-16.206	1.00	14.57
ATOM	6228	C	HIS	173	23.586	2.773	-17.207	1.00	15.85
ATOM	6229	O	HIS	173	23.480	4.007	-17.132	1.00	17.58
ATOM	6230	CB	HIS	173	25.934	2.188	-16.553	1.00	10.64
ATOM	6231	CG	HIS	173	26.851	1.918	-15.409	1.00	8.84
ATOM	6232	ND1	HIS	173	27.338	2.917	-14.594	1.00	9.45
ATOM	6233	CD2	HIS	173	27.358	0.760	-14.928	1.00	8.00
ATOM	6234	CE1	HIS	173	28.106	2.384	-13.659	1.00	9.58
ATOM	6235	NE2	HIS	173	28.135	1.076	-13.841	1.00	8.41
ATOM	6236	H	HIS	173	24.601	-0.080	-16.615	1.00	0.00
ATOM	6237	HD1	HIS	173	27.189	3.891	-14.673	1.00	0.00
ATOM	6238	HE2	HIS	173	28.689	0.434	-13.341	1.00	0.00
ATOM	6239	N	LEU	173A	22.973	2.045	-18.142	1.00	14.07
ATOM	6240	CA	LEU	173A	22.105	2.648	-19.149	1.00	11.77
ATOM	6241	C	LEU	173A	20.912	3.293	-18.459	1.00	13.24
ATOM	6242	O	LEU	173A	20.237	2.670	-17.640	1.00	14.73
ATOM	6243	CB	LEU	173A	21.613	1.587	-20.130	1.00	9.85
ATOM	6244	CG	LEU	173A	22.680	0.801	-20.894	1.00	10.26
ATOM	6245	CD1	LEU	173A	22.073	-0.397	-21.583	1.00	9.89
ATOM	6246	CD2	LEU	173A	23.349	1.691	-21.907	1.00	11.81
ATOM	6247	H	LEU	173A	23.103	1.071	-18.146	1.00	0.00
ATOM	6248	N	GLY	173B	20.677	4.563	-18.748	1.00	15.00
ATOM	6249	CA	GLY	173B	19.555	5.246	-18.138	1.00	18.48
ATOM	6250	C	GLY	173B	19.760	5.596	-16.674	1.00	22.14
ATOM	6251	O	GLY	173B	18.801	5.926	-15.978	1.00	24.14
ATOM	6252	H	GLY	173B	21.284	5.029	-19.353	1.00	0.00
ATOM	6253	N	ALA	173C	21.002	5.541	-16.203	1.00	22.27
ATOM	6254	CA	ALA	173C	21.306	5.882	-14.821	1.00	21.54
ATOM	6255	C	ALA	173C	22.427	6.914	-14.831	1.00	21.93
ATOM	6256	O	ALA	173C	23.227	6.955	-15.774	1.00	22.84
ATOM	6257	CB	ALA	173C	21.735	4.638	-14.059	1.00	21.95
ATOM	6258	H	ALA	173C	21.765	5.255	-16.747	1.00	0.00
ATOM	6259	N	TYR	173D	22.463	7.757	-13.798	1.00	21.41
ATOM	6260	CA	TYR	173D	23.479	8.810	-13.641	1.00	20.23
ATOM	6261	C	TYR	173D	24.840	8.274	-13.163	1.00	19.62
ATOM	6262	O	TYR	173D	25.873	8.907	-13.374	1.00	18.00
ATOM	6263	CB	TYR	173D	23.001	9.859	-12.628	1.00	20.30
ATOM	6264	CG	TYR	173D	21.779	10.658	-13.028	1.00	19.63
ATOM	6265	CD1	TYR	173D	21.840	11.596	-14.055	1.00	18.76
ATOM	6266	CD2	TYR	173D	20.575	10.512	-12.348	1.00	20.08
ATOM	6267	CE1	TYR	173D	20.739	12.364	-14.391	1.00	18.98
ATOM	6268	CE2	TYR	173D	19.467	11.279	-12.678	1.00	19.99
ATOM	6269	CZ	TYR	173D	19.558	12.201	-13.699	1.00	19.88
ATOM	6270	OH	TYR	173D	18.467	12.969	-14.021	1.00	22.48
ATOM	6271	H	TYR	173D	21.766	7.652	-13.138	1.00	0.00
ATOM	6272	HH	TYR	173D	17.822	12.842	-13.317	1.00	0.00
ATOM	6273	N	THR	173E	24.813	7.139	-12.467	1.00	20.33
ATOM	6274	CA	THR	173E	26.006	6.500	-11.932	1.00	20.71
ATOM	6275	C	THR	173E	27.124	6.421	-12.955	1.00	23.06
ATOM	6276	O	THR	173E	26.953	5.848	-14.040	1.00	24.05
ATOM	6277	CB	THR	173E	25.700	5.073	-11.476	1.00	19.83
ATOM	6278	OG1	THR	173E	24.477	5.060	-10.732	1.00	19.44
ATOM	6279	CG2	THR	173E	26.822	4.549	-10.607	1.00	19.36
ATOM	6280	H	THR	173E	23.956	6.720	-12.273	1.00	0.00

122/176

ATOM	6281	HG1	THR	173E	23.715	4.967	-11.309	1.00	0.00
ATOM	6282	N	GLY	173F	28.286	6.943	-12.577	1.00	24.83
ATOM	6283	CA	GLY	173F	29.440	6.941	-13.460	1.00	27.60
ATOM	6284	C	GLY	173F	29.882	5.561	-13.911	1.00	29.17
ATOM	6285	O	GLY	173F	29.857	4.599	-13.139	1.00	28.51
ATOM	6286	H	GLY	173F	28.353	7.307	-11.681	1.00	0.00
ATOM	6287	N	ASP	173G	30.303	5.468	-15.166	1.00	31.24
ATOM	6288	CA	ASP	173G	30.746	4.205	-15.729	1.00	33.43
ATOM	6289	C	ASP	173G	31.799	3.534	-14.871	1.00	34.71
ATOM	6290	O	ASP	173G	31.821	2.308	-14.759	1.00	36.55
ATOM	6291	CB	ASP	173G	31.272	4.405	-17.148	1.00	34.43
ATOM	6292	CG	ASP	173G	30.163	4.665	-18.144	1.00	36.11
ATOM	6293	OD1	ASP	173G	29.269	3.803	-18.274	1.00	37.29
ATOM	6294	OD2	ASP	173G	30.175	5.734	-18.789	1.00	36.29
ATOM	6295	H	ASP	173G	30.290	6.246	-15.758	1.00	0.00
ATOM	6296	N	ASP	173H	32.645	4.337	-14.234	1.00	34.50
ATOM	6297	CA	ASP	173H	33.706	3.803	-13.390	1.00	35.01
ATOM	6298	C	ASP	173H	33.194	3.142	-12.121	1.00	32.60
ATOM	6299	O	ASP	173H	33.854	2.265	-11.562	1.00	33.16
ATOM	6300	CB	ASP	173H	34.736	4.886	-13.070	1.00	40.25
ATOM	6301	CG	ASP	173H	35.561	5.281	-14.292	1.00	45.56
ATOM	6302	OD1	ASP	173H	36.179	4.388	-14.919	1.00	47.19
ATOM	6303	OD2	ASP	173H	35.557	6.475	-14.670	1.00	48.34
ATOM	6304	H	ASP	173H	32.567	5.306	-14.336	1.00	0.00
ATOM	6305	N	VAL	173I	31.995	3.517	-11.701	1.00	29.46
ATOM	6306	CA	VAL	173I	31.392	2.948	-10.509	1.00	27.51
ATOM	6307	C	VAL	173I	30.876	1.555	-10.833	1.00	27.15
ATOM	6308	O	VAL	173I	30.244	1.349	-11.871	1.00	27.25
ATOM	6309	CB	VAL	173I	30.220	3.801	-10.022	1.00	28.53
ATOM	6310	CG1	VAL	173I	29.587	3.177	-8.792	1.00	29.23
ATOM	6311	CG2	VAL	173I	30.690	5.215	-9.724	1.00	29.26
ATOM	6312	H	VAL	173I	31.480	4.166	-12.212	1.00	0.00
ATOM	6313	N	ARG	174	31.162	0.602	-9.949	1.00	26.56
ATOM	6314	CA	ARG	174	30.741	-0.781	-10.126	1.00	25.40
ATOM	6315	C	ARG	174	29.400	-1.036	-9.458	1.00	24.29
ATOM	6316	O	ARG	174	29.270	-0.899	-8.238	1.00	23.86
ATOM	6317	CB	ARG	174	31.784	-1.729	-9.535	1.00	27.85
ATOM	6318	CG	ARG	174	31.866	-3.094	-10.204	1.00	30.55
ATOM	6319	CD	ARG	174	32.704	-3.042	-11.473	1.00	34.47
ATOM	6320	NE	ARG	174	32.139	-2.146	-12.485	1.00	40.01
ATOM	6321	CZ	ARG	174	32.562	-0.903	-12.731	1.00	41.74
ATOM	6322	NH1	ARG	174	33.569	-0.378	-12.036	1.00	41.34
ATOM	6323	NH2	ARG	174	31.967	-0.184	-13.676	1.00	43.55
ATOM	6324	H	ARG	174	31.649	0.845	-9.137	1.00	0.00
ATOM	6325	HE	ARG	174	31.366	-2.490	-13.008	1.00	0.00
ATOM	6326	HH11	ARG	174	34.041	-0.908	-11.335	1.00	0.00
ATOM	6327	HH12	ARG	174	33.904	0.565	-12.183	1.00	0.00
ATOM	6328	HH21	ARG	174	31.198	-0.600	-14.168	1.00	0.00
ATOM	6329	HH22	ARG	174	32.159	0.760	-13.960	1.00	0.00
ATOM	6330	N	ILE	175	28.406	-1.395	-10.263	1.00	22.92
ATOM	6331	CA	ILE	175	27.073	-1.689	-9.762	1.00	21.26
ATOM	6332	C	ILE	175	27.008	-3.183	-9.441	1.00	21.48
ATOM	6333	O	ILE	175	26.802	-3.571	-8.284	1.00	21.74
ATOM	6334	CB	ILE	175	25.997	-1.280	-10.788	1.00	19.49
ATOM	6335	CG1	ILE	175	26.045	0.236	-10.992	1.00	19.32
ATOM	6336	CG2	ILE	175	24.609	-1.699	-10.312	1.00	20.43
ATOM	6337	H	ILE	175	28.573	-1.524	-11.216	1.00	0.00
ATOM	6338	CD	ILE	175	25.037	0.767	-11.987	1.00	19.59
ATOM	6339	N	VAL	176	27.211	-4.016	-10.453	1.00	20.59
ATOM	6340	CA	VAL	176	27.200	-5.454	-10.243	1.00	22.12
ATOM	6341	C	VAL	176	28.625	-5.879	-9.866	1.00	23.64
ATOM	6342	O	VAL	176	29.525	-5.942	-10.712	1.00	24.09
ATOM	6343	CB	VAL	176	26.638	-6.229	-11.484	1.00	22.49

123/176

ATOM	6344	CG1	VAL	176	27.286	-5.768	-12.752	1.00	23.91
ATOM	6345	CG2	VAL	176	26.833	-7.725	-11.320	1.00	22.89
ATOM	6346	H	VAL	176	27.448	-3.639	-11.332	1.00	0.00
ATOM	6347	N	ARG	177	28.825	-6.104	-8.570	1.00	24.34
ATOM	6348	CA	ARG	177	30.121	-6.492	-8.020	1.00	24.78
ATOM	6349	C	ARG	177	30.582	-7.911	-8.366	1.00	24.94
ATOM	6350	O	ARG	177	29.796	-8.735	-8.825	1.00	26.22
ATOM	6351	CB	ARG	177	30.113	-6.301	-6.504	1.00	27.87
ATOM	6352	CG	ARG	177	30.020	-4.850	-6.053	1.00	32.78
ATOM	6353	CD	ARG	177	28.587	-4.393	-5.807	1.00	37.25
ATOM	6354	NE	ARG	177	28.466	-2.933	-5.810	1.00	41.21
ATOM	6355	CZ	ARG	177	28.990	-2.118	-4.892	1.00	41.76
ATOM	6356	NH1	ARG	177	29.678	-2.606	-3.863	1.00	42.08
ATOM	6357	NH2	ARG	177	28.847	-0.805	-5.017	1.00	42.71
ATOM	6358	H	ARG	177	28.055	-6.018	-7.971	1.00	0.00
ATOM	6359	HE	ARG	177	27.922	-2.596	-6.568	1.00	0.00
ATOM	6360	HH11	ARG	177	29.751	-3.605	-3.754	1.00	0.00
ATOM	6361	HH12	ARG	177	30.087	-2.033	-3.162	1.00	0.00
ATOM	6362	HH21	ARG	177	28.339	-0.453	-5.814	1.00	0.00
ATOM	6363	HH22	ARG	177	29.173	-0.127	-4.371	1.00	0.00
ATOM	6364	N	ASP	178	31.854	-8.195	-8.097	1.00	24.59
ATOM	6365	CA	ASP	178	32.465	-9.500	-8.373	1.00	23.86
ATOM	6366	C	ASP	178	31.832	-10.745	-7.727	1.00	22.44
ATOM	6367	O	ASP	178	32.092	-11.872	-8.163	1.00	23.36
ATOM	6368	CB	ASP	178	33.963	-9.452	-8.038	1.00	25.64
ATOM	6369	CG	ASP	178	34.820	-8.997	-9.211	1.00	28.30
ATOM	6370	OD1	ASP	178	35.912	-9.581	-9.411	1.00	28.87
ATOM	6371	OD2	ASP	178	34.420	-8.059	-9.939	1.00	29.64
ATOM	6372	H	ASP	178	32.455	-7.517	-7.728	1.00	0.00
ATOM	6373	N	ASP	179	31.032	-10.564	-6.682	1.00	19.92
ATOM	6374	CA	ASP	179	30.385	-11.699	-6.024	1.00	18.90
ATOM	6375	C	ASP	179	28.914	-11.827	-6.426	1.00	19.64
ATOM	6376	O	ASP	179	28.108	-12.441	-5.724	1.00	20.69
ATOM	6377	CB	ASP	179	30.511	-11.592	-4.503	1.00	18.24
ATOM	6378	CG	ASP	179	29.754	-10.415	-3.932	1.00	18.83
ATOM	6379	OD1	ASP	179	29.864	-9.303	-4.489	1.00	20.67
ATOM	6380	OD2	ASP	179	29.052	-10.589	-2.918	1.00	19.22
ATOM	6381	H	ASP	179	30.867	-9.676	-6.294	1.00	0.00
ATOM	6382	N	MET	180	28.580	-11.286	-7.590	1.00	19.25
ATOM	6383	CA	MET	180	27.220	-11.334	-8.101	1.00	19.16
ATOM	6384	C	MET	180	27.245	-11.930	-9.497	1.00	20.32
ATOM	6385	O	MET	180	28.267	-11.873	-10.177	1.00	21.17
ATOM	6386	CB	MET	180	26.636	-9.921	-8.170	1.00	19.27
ATOM	6387	CG	MET	180	26.607	-9.183	-6.844	1.00	17.95
ATOM	6388	SD	MET	180	26.288	-7.431	-7.077	1.00	16.87
ATOM	6389	CE	MET	180	26.312	-6.863	-5.403	1.00	17.35
ATOM	6390	H	MET	180	29.243	-10.800	-8.121	1.00	0.00
ATOM	6391	N	LEU	181	26.115	-12.482	-9.921	1.00	22.07
ATOM	6392	CA	LEU	181	25.967	-13.098	-11.236	1.00	23.42
ATOM	6393	C	LEU	181	24.659	-12.593	-11.841	1.00	24.89
ATOM	6394	O	LEU	181	23.673	-12.409	-11.125	1.00	26.40
ATOM	6395	CB	LEU	181	25.928	-14.622	-11.083	1.00	23.48
ATOM	6396	CG	LEU	181	25.744	-15.515	-12.315	1.00	25.81
ATOM	6397	CD1	LEU	181	26.271	-16.911	-12.000	1.00	26.64
ATOM	6398	CD2	LEU	181	24.283	-15.578	-12.755	1.00	25.91
ATOM	6399	H	LEU	181	25.345	-12.478	-9.324	1.00	0.00
ATOM	6400	N	CYS	182	24.634	-12.389	-13.151	1.00	24.20
ATOM	6401	CA	CYS	182	23.426	-11.898	-13.794	1.00	24.34
ATOM	6402	C	CYS	182	22.797	-12.974	-14.666	1.00	25.33
ATOM	6403	O	CYS	182	23.502	-13.784	-15.269	1.00	26.32
ATOM	6404	CB	CYS	182	23.742	-10.648	-14.621	1.00	24.83
ATOM	6405	SG	CYS	182	24.561	-9.347	-13.647	1.00	27.72
ATOM	6406	H	CYS	182	25.411	-12.576	-13.711	1.00	0.00

124/126

ATOM	6407	N	ALA	183	21.470	-12.990	-14.712	1.00	25.85
ATOM	6408	CA	ALA	183	20.729	-13.956	-15.519	1.00	26.27
ATOM	6409	C	ALA	183	19.293	-13.487	-15.698	1.00	27.01
ATOM	6410	O	ALA	183	18.693	-12.933	-14.778	1.00	27.47
ATOM	6411	CB	ALA	183	20.749	-15.328	-14.861	1.00	26.34
ATOM	6412	H	ALA	183	20.960	-12.361	-14.149	1.00	0.00
ATOM	6413	N	GLY	184	18.761	-13.674	-16.900	1.00	27.29
ATOM	6414	CA	GLY	184	17.394	-13.275	-17.172	1.00	28.10
ATOM	6415	C	GLY	184	17.299	-12.258	-18.286	1.00	29.73
ATOM	6416	O	GLY	184	18.287	-11.976	-18.962	1.00	30.38
ATOM	6417	H	GLY	184	19.344	-14.026	-17.609	1.00	0.00
ATOM	6418	N	ASN	185	16.099	-11.730	-18.496	1.00	31.48
ATOM	6419	CA	ASN	185	15.841	-10.733	-19.528	1.00	33.77
ATOM	6420	C	ASN	185	14.380	-10.297	-19.487	1.00	36.43
ATOM	6421	O	ASN	185	13.611	-10.783	-18.657	1.00	38.67
ATOM	6422	CB	ASN	185	16.196	-11.271	-20.918	1.00	32.16
ATOM	6423	CG	ASN	185	15.516	-12.575	-21.225	1.00	31.74
ATOM	6424	OD1	ASN	185	14.300	-12.635	-21.390	1.00	31.49
ATOM	6425	ND2	ASN	185	16.298	-13.630	-21.324	1.00	32.97
ATOM	6426	H	ASN	185	15.356	-12.019	-17.925	1.00	0.00
ATOM	6427	HD21	ASN	185	17.258	-13.440	-21.191	1.00	0.00
ATOM	6428	HD22	ASN	185	15.927	-14.511	-21.488	1.00	0.00
ATOM	6429	N	THR	186	13.998	-9.429	-20.423	1.00	37.10
ATOM	6430	CA	THR	186	12.641	-8.885	-20.521	1.00	37.46
ATOM	6431	C	THR	186	11.484	-9.886	-20.613	1.00	38.35
ATOM	6432	O	THR	186	10.318	-9.485	-20.643	1.00	39.07
ATOM	6433	CB	THR	186	12.537	-7.887	-21.700	1.00	36.60
ATOM	6434	OG1	THR	186	13.232	-8.411	-22.840	1.00	36.52
ATOM	6435	CG2	THR	186	13.151	-6.560	-21.323	1.00	36.21
ATOM	6436	H	THR	186	14.628	-9.122	-21.102	1.00	0.00
ATOM	6437	HG1	THR	186	13.486	-7.635	-23.357	1.00	0.00
ATOM	6438	N	ARG	187	11.803	-11.175	-20.691	1.00	38.27
ATOM	6439	CA	ARG	187	10.783	-12.208	-20.777	1.00	38.12
ATOM	6440	C	ARG	187	10.870	-13.155	-19.595	1.00	36.90
ATOM	6441	O	ARG	187	9.848	-13.555	-19.041	1.00	37.32
ATOM	6442	CB	ARG	187	10.931	-12.993	-22.081	1.00	40.52
ATOM	6443	CG	ARG	187	10.638	-12.183	-23.340	1.00	44.95
ATOM	6444	CD	ARG	187	11.503	-12.646	-24.500	1.00	49.28
ATOM	6445	NE	ARG	187	12.925	-12.450	-24.207	1.00	53.89
ATOM	6446	CZ	ARG	187	13.687	-11.514	-24.769	1.00	55.78
ATOM	6447	NH1	ARG	187	13.162	-10.679	-25.661	1.00	57.86
ATOM	6448	NH2	ARG	187	14.969	-11.403	-24.431	1.00	56.74
ATOM	6449	H	ARG	187	12.729	-11.465	-20.697	1.00	0.00
ATOM	6450	HE	ARG	187	13.291	-13.011	-23.486	1.00	0.00
ATOM	6451	HH11	ARG	187	12.188	-10.764	-25.896	1.00	0.00
ATOM	6452	HH12	ARG	187	13.681	-9.958	-26.122	1.00	0.00
ATOM	6453	HH21	ARG	187	15.376	-12.002	-23.743	1.00	0.00
ATOM	6454	HH22	ARG	187	15.563	-10.706	-24.842	1.00	0.00
ATOM	6455	N	ARG	188	12.090	-13.499	-19.199	1.00	34.95
ATOM	6456	CA	ARG	188	12.291	-14.419	-18.090	1.00	33.39
ATOM	6457	C	ARG	188	13.176	-13.830	-17.011	1.00	31.05
ATOM	6458	O	ARG	188	14.244	-13.317	-17.313	1.00	31.13
ATOM	6459	CB	ARG	188	12.912	-15.707	-18.604	1.00	34.87
ATOM	6460	CG	ARG	188	12.110	-16.357	-19.699	1.00	38.68
ATOM	6461	CD	ARG	188	12.864	-16.328	-21.000	1.00	42.02
ATOM	6462	NE	ARG	188	14.109	-17.081	-20.896	1.00	46.41
ATOM	6463	CZ	ARG	188	14.997	-17.211	-21.876	1.00	49.05
ATOM	6464	NH1	ARG	188	14.781	-16.635	-23.058	1.00	50.82
ATOM	6465	NH2	ARG	188	16.101	-17.923	-21.669	1.00	49.87
ATOM	6466	H	ARG	188	12.874	-13.106	-19.634	1.00	0.00
ATOM	6467	HE	ARG	188	14.297	-17.552	-20.048	1.00	0.00
ATOM	6468	HH11	ARG	188	13.927	-16.133	-23.209	1.00	0.00
ATOM	6469	HH12	ARG	188	15.415	-16.715	-23.831	1.00	0.00

125/126

ATOM	6470	HH21ARG	188	16.201	-18.344	-20.755	1.00	0.00
ATOM	6471	HH22ARG	188	16.826	-18.065	-22.347	1.00	0.00
ATOM	6472	N ASP	189	12.742	-13.939	-15.757	1.00	28.76
ATOM	6473	CA ASP	189	13.483	-13.417	-14.609	1.00	27.44
ATOM	6474	C ASP	189	12.762	-13.771	-13.316	1.00	27.00
ATOM	6475	O ASP	189	11.556	-14.000	-13.315	1.00	27.79
ATOM	6476	CB ASP	189	13.617	-11.889	-14.697	1.00	27.38
ATOM	6477	CG ASP	189	14.373	-11.287	-13.513	1.00	28.22
ATOM	6478	OD1 ASP	189	15.276	-11.942	-12.948	1.00	29.82
ATOM	6479	OD2 ASP	189	14.064	-10.141	-13.148	1.00	27.89
ATOM	6480	H ASP	189	11.880	-14.372	-15.576	1.00	0.00
ATOM	6481	N SER	190	13.515	-13.882	-12.230	1.00	26.45
ATOM	6482	CA SER	190	12.943	-14.172	-10.920	1.00	25.89
ATOM	6483	C SER	190	12.269	-12.883	-10.450	1.00	24.87
ATOM	6484	O SER	190	12.551	-11.807	-10.984	1.00	25.54
ATOM	6485	CB SER	190	14.043	-14.597	-9.945	1.00	26.77
ATOM	6486	OG SER	190	15.255	-13.894	-10.197	1.00	29.26
ATOM	6487	H SER	190	14.476	-13.723	-12.340	1.00	0.00
ATOM	6488	HG SER	190	15.102	-13.099	-10.754	1.00	0.00
ATOM	6489	N CYS	191	11.389	-12.968	-9.462	1.00	22.26
ATOM	6490	CA CYS	191	10.710	-11.773	-9.001	1.00	20.67
ATOM	6491	C CYS	191	10.534	-11.759	-7.493	1.00	20.52
ATOM	6492	O CYS	191	11.106	-12.585	-6.786	1.00	19.52
ATOM	6493	CB CYS	191	9.365	-11.658	-9.714	1.00	21.01
ATOM	6494	SG CYS	191	8.594	-10.013	-9.644	1.00	21.77
ATOM	6495	H CYS	191	11.174	-13.827	-9.039	1.00	0.00
ATOM	6496	N GLN	192	9.777	-10.788	-6.992	1.00	22.70
ATOM	6497	CA GLN	192	9.521	-10.674	-5.558	1.00	25.29
ATOM	6498	C GLN	192	9.036	-11.998	-4.990	1.00	23.12
ATOM	6499	O GLN	192	8.080	-12.575	-5.496	1.00	23.43
ATOM	6500	CB GLN	192	8.456	-9.606	-5.281	1.00	31.39
ATOM	6501	CG GLN	192	8.913	-8.171	-5.491	1.00	38.85
ATOM	6502	CD GLN	192	10.047	-7.782	-4.560	1.00	43.04
ATOM	6503	OE1 GLN	192	10.028	-8.106	-3.363	1.00	45.01
ATOM	6504	NE2 GLN	192	11.052	-7.096	-5.107	1.00	43.76
ATOM	6505	H GLN	192	9.359	-10.141	-7.598	1.00	0.00
ATOM	6506	HE21GLN	192	10.987	-6.875	-6.071	1.00	0.00
ATOM	6507	HE22GLN	192	11.810	-6.842	-4.549	1.00	0.00
ATOM	6508	N GLY	193	9.689	-12.470	-3.938	1.00	20.67
ATOM	6509	CA GLY	193	9.289	-13.722	-3.328	1.00	18.84
ATOM	6510	C GLY	193	10.253	-14.848	-3.625	1.00	18.03
ATOM	6511	O GLY	193	10.338	-15.817	-2.863	1.00	19.56
ATOM	6512	H GLY	193	10.452	-11.989	-3.569	1.00	0.00
ATOM	6513	N ASP	194	10.974	-14.735	-4.732	1.00	15.66
ATOM	6514	CA ASP	194	11.927	-15.761	-5.101	1.00	15.59
ATOM	6515	C ASP	194	13.253	-15.573	-4.377	1.00	16.52
ATOM	6516	O ASP	194	14.087	-16.476	-4.350	1.00	16.73
ATOM	6517	CB ASP	194	12.129	-15.778	-6.614	1.00	14.53
ATOM	6518	CG ASP	194	10.874	-16.191	-7.366	1.00	13.66
ATOM	6519	OD1 ASP	194	10.233	-17.183	-6.972	1.00	13.44
ATOM	6520	OD2 ASP	194	10.520	-15.521	-8.357	1.00	12.82
ATOM	6521	H ASP	194	10.881	-13.985	-5.355	1.00	0.00
ATOM	6522	N SER	195	13.430	-14.412	-3.759	1.00	17.66
ATOM	6523	CA SER	195	14.658	-14.107	-3.032	1.00	19.29
ATOM	6524	C SER	195	15.060	-15.277	-2.167	1.00	19.20
ATOM	6525	O SER	195	14.213	-15.899	-1.531	1.00	19.25
ATOM	6526	CB SER	195	14.480	-12.870	-2.152	1.00	21.52
ATOM	6527	OG SER	195	14.637	-11.662	-2.891	1.00	22.42
ATOM	6528	H SER	195	12.720	-13.758	-3.820	1.00	0.00
ATOM	6529	N GLY	196	16.347	-15.598	-2.180	1.00	19.52
ATOM	6530	CA GLY	196	16.830	-16.713	-1.392	1.00	21.10
ATOM	6531	C GLY	196	16.793	-18.017	-2.167	1.00	23.58
ATOM	6532	O GLY	196	17.409	-18.994	-1.747	1.00	26.35

126/126

ATOM	6533	H	GLY	196	16.943	-15.056	-2.736	1.00	0.00
ATOM	6534	N	GLY	197	16.106	-18.025	-3.311	1.00	23.82
ATOM	6535	CA	GLY	197	16.002	-19.223	-4.139	1.00	24.01
ATOM	6536	C	GLY	197	17.256	-19.562	-4.928	1.00	24.11
ATOM	6537	O	GLY	197	18.127	-18.713	-5.080	1.00	24.81
ATOM	6538	H	GLY	197	15.625	-17.241	-3.623	1.00	0.00
ATOM	6539	N	PRO	198	17.374	-20.788	-5.460	1.00	24.65
ATOM	6540	CA	PRO	198	18.563	-21.172	-6.224	1.00	24.52
ATOM	6541	C	PRO	198	18.539	-20.972	-7.727	1.00	24.82
ATOM	6542	O	PRO	198	17.490	-20.951	-8.363	1.00	25.00
ATOM	6543	CB	PRO	198	18.690	-22.656	-5.909	1.00	23.87
ATOM	6544	CG	PRO	198	17.268	-23.091	-5.904	1.00	24.74
ATOM	6545	CD	PRO	198	16.572	-21.979	-5.116	1.00	25.53
ATOM	6546	N	LEU	199	19.734	-20.821	-8.275	1.00	25.70
ATOM	6547	CA	LEU	199	19.941	-20.701	-9.704	1.00	26.54
ATOM	6548	C	LEU	199	20.872	-21.884	-9.958	1.00	29.37
ATOM	6549	O	LEU	199	22.048	-21.848	-9.576	1.00	31.12
ATOM	6550	CB	LEU	199	20.646	-19.394	-10.057	1.00	24.78
ATOM	6551	CG	LEU	199	21.342	-19.373	-11.428	1.00	24.32
ATOM	6552	CD1	LEU	199	20.334	-19.520	-12.546	1.00	23.19
ATOM	6553	CD2	LEU	199	22.137	-18.092	-11.598	1.00	24.50
ATOM	6554	H	LEU	199	20.514	-20.763	-7.675	1.00	0.00
ATOM	6555	N	VAL	200	20.322	-22.959	-10.511	1.00	29.76
ATOM	6556	CA	VAL	200	21.096	-24.159	-10.796	1.00	28.82
ATOM	6557	C	VAL	200	21.313	-24.287	-12.283	1.00	29.84
ATOM	6558	O	VAL	200	20.422	-23.967	-13.071	1.00	29.99
ATOM	6559	CB	VAL	200	20.373	-25.415	-10.315	1.00	28.66
ATOM	6560	CG1	VAL	200	20.300	-25.415	-8.810	1.00	30.02
ATOM	6561	CG2	VAL	200	18.971	-25.472	-10.898	1.00	28.90
ATOM	6562	H	VAL	200	19.388	-22.888	-10.803	1.00	0.00
ATOM	6563	N	CYS	201	22.498	-24.747	-12.663	1.00	31.53
ATOM	6564	CA	CYS	201	22.832	-24.929	-14.073	1.00	33.30
ATOM	6565	C	CYS	201	23.204	-26.383	-14.353	1.00	34.58
ATOM	6566	O	CYS	201	23.748	-27.079	-13.487	1.00	33.37
ATOM	6567	CB	CYS	201	23.986	-24.011	-14.473	1.00	33.64
ATOM	6568	SG	CYS	201	23.714	-22.241	-14.150	1.00	33.75
ATOM	6569	H	CYS	201	23.147	-24.973	-11.972	1.00	0.00
ATOM	6570	N	LYS	202	22.852	-26.847	-15.546	1.00	37.19
ATOM	6571	CA	LYS	202	23.141	-28.209	-15.977	1.00	41.17
ATOM	6572	C	LYS	202	24.597	-28.304	-16.446	1.00	43.78
ATOM	6573	O	LYS	202	24.894	-28.170	-17.638	1.00	44.36
ATOM	6574	CB	LYS	202	22.170	-28.598	-17.100	1.00	42.84
ATOM	6575	CG	LYS	202	22.556	-29.821	-17.921	1.00	45.62
ATOM	6576	CD	LYS	202	22.537	-31.089	-17.106	1.00	48.05
ATOM	6577	CE	LYS	202	21.135	-31.416	-16.636	1.00	50.09
ATOM	6578	NZ	LYS	202	21.097	-32.727	-15.932	1.00	52.03
ATOM	6579	H	LYS	202	22.380	-26.224	-16.139	1.00	0.00
ATOM	6580	HZ1	LYS	202	21.851	-32.701	-15.208	1.00	0.00
ATOM	6581	HZ2	LYS	202	21.327	-33.497	-16.585	1.00	0.00
ATOM	6582	HZ3	LYS	202	20.180	-32.892	-15.480	1.00	0.00
ATOM	6583	N	VAL	203	25.507	-28.524	-15.502	1.00	46.37
ATOM	6584	CA	VAL	203	26.927	-28.619	-15.826	1.00	48.08
ATOM	6585	C	VAL	203	27.372	-30.065	-15.900	1.00	49.20
ATOM	6586	O	VAL	203	27.544	-30.730	-14.877	1.00	48.26
ATOM	6587	CB	VAL	203	27.801	-27.881	-14.800	1.00	48.34
ATOM	6588	CG1	VAL	203	29.279	-28.070	-15.136	1.00	48.37
ATOM	6589	CG2	VAL	203	27.444	-26.405	-14.782	1.00	48.31
ATOM	6590	H	VAL	203	25.234	-28.693	-14.573	1.00	0.00
ATOM	6591	N	ASN	204	27.569	-30.533	-17.128	1.00	51.36
ATOM	6592	CA	ASN	204	27.998	-31.902	-17.388	1.00	52.84
ATOM	6593	C	ASN	204	27.224	-32.891	-16.530	1.00	52.15
ATOM	6594	O	ASN	204	27.750	-33.463	-15.573	1.00	52.01
ATOM	6595	CB	ASN	204	29.510	-32.060	-17.164	1.00	55.18

122/176

ATOM	6596	CG	ASN	204	30.347	-31.520	-18.328	1.00	57.60
ATOM	6597	OD1	ASN	204	31.575	-31.569	-18.287	1.00	59.24
ATOM	6598	ND2	ASN	204	29.687	-31.015	-19.371	1.00	58.19
ATOM	6599	H	ASN	204	27.393	-29.907	-17.860	1.00	0.00
ATOM	6600	HD21	ASN	204	28.718	-30.974	-19.440	1.00	0.00
ATOM	6601	HD22	ASN	204	30.289	-30.695	-20.076	1.00	0.00
ATOM	6602	N	GLY	205	25.957	-33.075	-16.875	1.00	51.28
ATOM	6603	CA	GLY	205	25.133	-33.994	-16.123	1.00	50.61
ATOM	6604	C	GLY	205	24.649	-33.371	-14.830	1.00	50.05
ATOM	6605	O	GLY	205	23.497	-32.937	-14.751	1.00	52.30
ATOM	6606	H	GLY	205	25.587	-32.580	-17.629	1.00	0.00
ATOM	6607	N	THR	206	25.528	-33.274	-13.839	1.00	47.21
ATOM	6608	CA	THR	206	25.168	-32.719	-12.537	1.00	43.80
ATOM	6609	C	THR	206	24.671	-31.275	-12.508	1.00	40.99
ATOM	6610	O	THR	206	25.148	-30.419	-13.256	1.00	40.64
ATOM	6611	CB	THR	206	26.320	-32.887	-11.524	1.00	44.25
ATOM	6612	OG1	THR	206	27.563	-33.055	-12.223	1.00	45.62
ATOM	6613	CG2	THR	206	26.070	-34.102	-10.644	1.00	44.19
ATOM	6614	H	THR	206	26.456	-33.569	-13.982	1.00	0.00
ATOM	6615	HG1	THR	206	27.666	-32.360	-12.896	1.00	0.00
ATOM	6616	N	TRP	207	23.649	-31.044	-11.690	1.00	38.59
ATOM	6617	CA	TRP	207	23.073	-29.720	-11.515	1.00	36.46
ATOM	6618	C	TRP	207	23.920	-29.070	-10.442	1.00	34.43
ATOM	6619	O	TRP	207	24.178	-29.680	-9.404	1.00	35.65
ATOM	6620	CB	TRP	207	21.629	-29.796	-10.992	1.00	37.90
ATOM	6621	CG	TRP	207	20.563	-29.997	-12.031	1.00	39.17
ATOM	6622	CD1	TRP	207	19.836	-31.128	-12.239	1.00	40.06
ATOM	6623	CD2	TRP	207	20.096	-29.039	-12.995	1.00	39.34
ATOM	6624	NE1	TRP	207	18.947	-30.941	-13.272	1.00	40.33
ATOM	6625	CE2	TRP	207	19.085	-29.669	-13.756	1.00	39.24
ATOM	6626	CE3	TRP	207	20.432	-27.713	-13.293	1.00	39.51
ATOM	6627	CZ2	TRP	207	18.409	-29.021	-14.796	1.00	38.76
ATOM	6628	CZ3	TRP	207	19.756	-27.067	-14.330	1.00	39.46
ATOM	6629	CH2	TRP	207	18.757	-27.725	-15.067	1.00	38.53
ATOM	6630	H	TRP	207	23.311	-31.768	-11.133	1.00	0.00
ATOM	6631	HE1	TRP	207	18.288	-31.604	-13.566	1.00	0.00
ATOM	6632	N	LEU	208	24.361	-27.845	-10.683	1.00	30.99
ATOM	6633	CA	LEU	208	25.158	-27.140	-9.697	1.00	28.84
ATOM	6634	C	LEU	208	24.458	-25.835	-9.330	1.00	28.19
ATOM	6635	O	LEU	208	23.900	-25.162	-10.203	1.00	29.30
ATOM	6636	CB	LEU	208	26.541	-26.845	-10.263	1.00	28.96
ATOM	6637	CG	LEU	208	27.318	-28.014	-10.861	1.00	29.11
ATOM	6638	CD1	LEU	208	28.641	-27.486	-11.393	1.00	30.26
ATOM	6639	CD2	LEU	208	27.549	-29.103	-9.822	1.00	28.70
ATOM	6640	H	LEU	208	24.159	-27.435	-11.550	1.00	0.00
ATOM	6641	N	GLN	209	24.432	-25.496	-8.043	1.00	26.54
ATOM	6642	CA	GLN	209	23.795	-24.250	-7.633	1.00	25.71
ATOM	6643	C	GLN	209	24.765	-23.107	-7.856	1.00	24.56
ATOM	6644	O	GLN	209	25.604	-22.815	-7.002	1.00	24.28
ATOM	6645	CB	GLN	209	23.331	-24.270	-6.171	1.00	26.24
ATOM	6646	CG	GLN	209	22.574	-22.988	-5.777	1.00	26.14
ATOM	6647	CD	GLN	209	21.934	-23.034	-4.395	1.00	26.48
ATOM	6648	OE1	GLN	209	21.284	-22.077	-3.977	1.00	27.75
ATOM	6649	NE2	GLN	209	22.111	-24.137	-3.684	1.00	26.12
ATOM	6650	H	GLN	209	24.840	-26.121	-7.400	1.00	0.00
ATOM	6651	HE21	GLN	209	22.655	-24.897	-3.954	1.00	0.00
ATOM	6652	HE22	GLN	209	21.587	-24.089	-2.856	1.00	0.00
ATOM	6653	N	ALA	210	24.625	-22.462	-9.009	1.00	23.35
ATOM	6654	CA	ALA	210	25.478	-21.348	-9.397	1.00	22.24
ATOM	6655	C	ALA	210	25.290	-20.130	-8.514	1.00	21.09
ATOM	6656	O	ALA	210	26.261	-19.557	-8.004	1.00	21.42
ATOM	6657	CB	ALA	210	25.225	-20.982	-10.841	1.00	22.75
ATOM	6658	H	ALA	210	23.892	-22.733	-9.603	1.00	0.00

128/176

ATOM	6659	N	GLY	211	24.040	-19.741	-8.316	1.00	19.37
ATOM	6660	CA	GLY	211	23.795	-18.577	-7.502	1.00	17.64
ATOM	6661	C	GLY	211	22.568	-18.677	-6.644	1.00	16.46
ATOM	6662	O	GLY	211	21.914	-19.725	-6.578	1.00	14.97
ATOM	6663	H	GLY	211	23.301	-20.270	-8.679	1.00	0.00
ATOM	6664	N	VAL	212	22.254	-17.547	-6.022	1.00	16.39
ATOM	6665	CA	VAL	212	21.111	-17.390	-5.129	1.00	16.42
ATOM	6666	C	VAL	212	20.413	-16.088	-5.555	1.00	17.78
ATOM	6667	O	VAL	212	21.088	-15.105	-5.856	1.00	21.70
ATOM	6668	CB	VAL	212	21.601	-17.257	-3.666	1.00	14.63
ATOM	6669	CG1	VAL	212	20.435	-17.100	-2.726	1.00	16.34
ATOM	6670	CG2	VAL	212	22.436	-18.463	-3.276	1.00	13.21
ATOM	6671	H	VAL	212	22.823	-16.764	-6.174	1.00	0.00
ATOM	6672	N	VAL	213	19.082	-16.083	-5.615	1.00	15.90
ATOM	6673	CA	VAL	213	18.325	-14.891	-6.018	1.00	15.13
ATOM	6674	C	VAL	213	18.503	-13.786	-4.986	1.00	18.46
ATOM	6675	O	VAL	213	17.893	-13.838	-3.912	1.00	20.95
ATOM	6676	CB	VAL	213	16.833	-15.188	-6.141	1.00	12.87
ATOM	6677	CG1	VAL	213	16.130	-14.013	-6.751	1.00	11.61
ATOM	6678	CG2	VAL	213	16.609	-16.418	-6.975	1.00	13.44
ATOM	6679	H	VAL	213	18.628	-16.914	-5.381	1.00	0.00
ATOM	6680	N	SER	214	19.286	-12.768	-5.335	1.00	20.04
ATOM	6681	CA	SER	214	19.586	-11.668	-4.421	1.00	21.15
ATOM	6682	C	SER	214	18.839	-10.348	-4.641	1.00	21.80
ATOM	6683	O	SER	214	18.095	-9.913	-3.765	1.00	22.00
ATOM	6684	CB	SER	214	21.102	-11.426	-4.412	1.00	22.01
ATOM	6685	OG	SER	214	21.474	-10.349	-3.572	1.00	22.72
ATOM	6686	H	SER	214	19.678	-12.718	-6.237	1.00	0.00
ATOM	6687	HG	SER	214	21.364	-10.653	-2.664	1.00	0.00
ATOM	6688	N	TRP	215	19.067	-9.687	-5.774	1.00	23.44
ATOM	6689	CA	TRP	215	18.407	-8.410	-6.044	1.00	25.65
ATOM	6690	C	TRP	215	18.229	-8.096	-7.527	1.00	26.77
ATOM	6691	O	TRP	215	18.471	-8.946	-8.387	1.00	25.97
ATOM	6692	CB	TRP	215	19.134	-7.245	-5.335	1.00	27.15
ATOM	6693	CG	TRP	215	20.481	-6.825	-5.917	1.00	28.74
ATOM	6694	CD1	TRP	215	21.649	-7.518	-5.847	1.00	29.32
ATOM	6695	CD2	TRP	215	20.784	-5.604	-6.626	1.00	29.57
ATOM	6696	NE1	TRP	215	22.656	-6.816	-6.461	1.00	29.92
ATOM	6697	CE2	TRP	215	22.156	-5.640	-6.951	1.00	28.88
ATOM	6698	CE3	TRP	215	20.027	-4.487	-7.015	1.00	31.43
ATOM	6699	CZ2	TRP	215	22.794	-4.607	-7.651	1.00	29.19
ATOM	6700	CZ3	TRP	215	20.665	-3.453	-7.714	1.00	30.67
ATOM	6701	CH2	TRP	215	22.037	-3.527	-8.022	1.00	28.91
ATOM	6702	H	TRP	215	19.648	-10.073	-6.469	1.00	0.00
ATOM	6703	HE1	TRP	215	23.586	-7.127	-6.519	1.00	0.00
ATOM	6704	N	GLY	216	17.763	-6.878	-7.800	1.00	27.70
ATOM	6705	CA	GLY	216	17.539	-6.419	-9.159	1.00	30.66
ATOM	6706	C	GLY	216	16.542	-5.275	-9.124	1.00	33.49
ATOM	6707	O	GLY	216	15.815	-5.137	-8.142	1.00	35.70
ATOM	6708	H	GLY	216	17.526	-6.262	-7.076	1.00	0.00
ATOM	6709	N	GLU	217	16.531	-4.431	-10.153	1.00	34.80
ATOM	6710	CA	GLU	217	15.595	-3.302	-10.221	1.00	35.38
ATOM	6711	C	GLU	217	14.288	-3.733	-10.901	1.00	34.97
ATOM	6712	O	GLU	217	14.105	-3.545	-12.104	1.00	36.03
ATOM	6713	CB	GLU	217	16.223	-2.103	-10.966	1.00	37.29
ATOM	6714	CG	GLU	217	17.397	-1.421	-10.224	1.00	39.90
ATOM	6715	CD	GLU	217	17.968	-0.196	-10.947	1.00	39.47
ATOM	6716	OE1	GLU	217	19.122	-0.260	-11.417	1.00	39.59
ATOM	6717	OE2	GLU	217	17.278	0.838	-11.031	1.00	39.08
ATOM	6718	H	GLU	217	17.179	-4.583	-10.877	1.00	0.00
ATOM	6719	N	GLY	219	13.371	-4.296	-10.126	1.00	33.56
ATOM	6720	CA	GLY	219	12.116	-4.746	-10.691	1.00	32.04
ATOM	6721	C	GLY	219	12.249	-6.189	-11.122	1.00	31.59

129/176

ATOM	6722	O	GLY	219	13.151	-6.887	-10.659	1.00	31.71
ATOM	6723	H	GLY	219	13.527	-4.434	-9.166	1.00	0.00
ATOM	6724	N	CYS	220	11.336	-6.642	-11.977	1.00	31.16
ATOM	6725	CA	CYS	220	11.347	-8.012	-12.482	1.00	29.45
ATOM	6726	C	CYS	220	11.210	-8.000	-14.001	1.00	29.22
ATOM	6727	O	CYS	220	10.277	-7.407	-14.540	1.00	29.78
ATOM	6728	CB	CYS	220	10.191	-8.800	-11.879	1.00	26.84
ATOM	6729	SG	CYS	220	10.118	-8.745	-10.067	1.00	24.11
ATOM	6730	H	CYS	220	10.601	-6.083	-12.299	1.00	0.00
ATOM	6731	N	ALA	221	12.152	-8.641	-14.685	1.00	28.48
ATOM	6732	CA	ALA	221	12.162	-8.703	-16.142	1.00	28.12
ATOM	6733	C	ALA	221	12.144	-7.304	-16.760	1.00	28.63
ATOM	6734	O	ALA	221	11.514	-7.086	-17.791	1.00	28.69
ATOM	6735	CB	ALA	221	10.985	-9.528	-16.648	1.00	26.67
ATOM	6736	H	ALA	221	12.861	-9.086	-14.179	1.00	0.00
ATOM	6737	N	GLN	221A	12.868	-6.372	-16.140	1.00	29.21
ATOM	6738	CA	GLN	221A	12.947	-4.983	-16.610	1.00	29.30
ATOM	6739	C	GLN	221A	14.060	-4.782	-17.643	1.00	28.92
ATOM	6740	O	GLN	221A	15.148	-5.355	-17.515	1.00	29.52
ATOM	6741	CB	GLN	221A	13.188	-4.038	-15.429	1.00	30.02
ATOM	6742	CG	GLN	221A	12.007	-3.876	-14.489	1.00	31.52
ATOM	6743	CD	GLN	221A	10.976	-2.503	-15.012	1.00	32.45
ATOM	6744	OE1	GLN	221A	9.842	-3.275	-15.306	1.00	33.26
ATOM	6745	NE2	GLN	221A	11.363	-1.640	-15.116	1.00	33.17
ATOM	6746	H	GLN	221A	13.404	-6.645	-15.367	1.00	0.00
ATOM	6747	HE21	GLN	221A	12.278	-1.411	-14.849	1.00	0.00
ATOM	6748	HE22	GLN	221A	10.703	-1.008	-15.461	1.00	0.00
ATOM	6749	N	PRO	222	13.810	-3.948	-18.674	1.00	28.32
ATOM	6750	CA	PRO	222	14.795	-3.669	-19.729	1.00	27.33
ATOM	6751	C	PRO	222	16.116	-3.136	-19.162	1.00	27.39
ATOM	6752	O	PRO	222	16.125	-2.226	-18.324	1.00	28.99
ATOM	6753	CB	PRO	222	14.093	-2.609	-20.580	1.00	26.61
ATOM	6754	CG	PRO	222	12.645	-2.930	-20.400	1.00	26.93
ATOM	6755	CD	PRO	222	12.557	-3.209	-18.923	1.00	27.93
ATOM	6756	N	ASN	223	17.223	-3.725	-19.612	1.00	25.39
ATOM	6757	CA	ASN	223	18.565	-3.346	-19.175	1.00	22.48
ATOM	6758	C	ASN	223	18.787	-3.547	-17.682	1.00	21.50
ATOM	6759	O	ASN	223	19.623	-2.869	-17.087	1.00	22.68
ATOM	6760	CB	ASN	223	18.869	-1.895	-19.548	1.00	21.76
ATOM	6761	CG	ASN	223	18.848	-1.662	-21.036	1.00	22.23
ATOM	6762	OD1	ASN	223	18.353	-0.642	-21.511	1.00	24.31
ATOM	6763	ND2	ASN	223	19.391	-2.607	-21.787	1.00	23.45
ATOM	6764	H	ASN	223	17.103	-4.445	-20.258	1.00	0.00
ATOM	6765	HD21	ASN	223	19.786	-3.395	-21.380	1.00	0.00
ATOM	6766	HD22	ASN	223	19.368	-2.423	-22.748	1.00	0.00
ATOM	6767	N	ARG	224	18.024	-4.453	-17.078	1.00	19.10
ATOM	6768	CA	ARG	224	18.145	-4.746	-15.653	1.00	18.27
ATOM	6769	C	ARG	224	17.947	-6.246	-15.360	1.00	19.54
ATOM	6770	O	ARG	224	16.875	-6.678	-14.909	1.00	19.90
ATOM	6771	CB	ARG	224	17.121	-3.938	-14.863	1.00	16.15
ATOM	6772	CG	ARG	224	17.224	-2.448	-15.019	1.00	15.73
ATOM	6773	CD	ARG	224	18.406	-1.911	-14.259	1.00	16.61
ATOM	6774	NE	ARG	224	18.401	-0.448	-14.180	1.00	16.66
ATOM	6775	CZ	ARG	224	18.801	0.363	-15.156	1.00	14.80
ATOM	6776	NH1	ARG	224	19.235	-0.142	-16.307	1.00	12.82
ATOM	6777	NH2	ARG	224	18.819	1.677	-14.959	1.00	13.81
ATOM	6778	H	ARG	224	17.290	-4.913	-17.540	1.00	0.00
ATOM	6779	HE	ARG	224	18.108	-0.049	-13.316	1.00	0.00
ATOM	6780	HH11	ARG	224	19.309	-1.130	-16.488	1.00	0.00
ATOM	6781	HH12	ARG	224	19.558	0.486	-17.016	1.00	0.00
ATOM	6782	HH21	ARG	224	18.512	2.079	-14.068	1.00	0.00
ATOM	6783	HH22	ARG	224	19.132	2.309	-15.661	1.00	0.00
ATOM	6784	N	PRO	225	18.944	-7.077	-15.706	1.00	18.61

130/126

ATOM	6785	CA	PRO	225	18.818	-8.511	-15.446	1.00	17.77
ATOM	6786	C	PRO	225	18.833	-8.753	-13.939	1.00	18.57
ATOM	6787	O	PRO	225	19.244	-7.874	-13.174	1.00	19.67
ATOM	6788	CB	PRO	225	20.067	-9.074	-16.110	1.00	16.82
ATOM	6789	CG	PRO	225	20.269	-8.147	-17.253	1.00	16.81
ATOM	6790	CD	PRO	225	20.096	-6.818	-16.581	1.00	18.08
ATOM	6791	N	GLY	226	18.360	-9.919	-13.513	1.00	18.16
ATOM	6792	CA	GLY	226	18.340	-10.230	-12.097	1.00	17.73
ATOM	6793	C	GLY	226	19.736	-10.516	-11.595	1.00	17.93
ATOM	6794	O	GLY	226	20.527	-11.149	-12.288	1.00	19.71
ATOM	6795	H	GLY	226	17.996	-10.604	-14.113	1.00	0.00
ATOM	6796	N	ILE	227	20.069	-10.021	-10.414	1.00	17.86
ATOM	6797	CA	ILE	227	21.387	-10.273	-9.857	1.00	18.04
ATOM	6798	C	ILE	227	21.294	-11.391	-8.820	1.00	18.05
ATOM	6799	O	ILE	227	20.384	-11.419	-7.984	1.00	19.22
ATOM	6800	CB	ILE	227	22.007	-9.006	-9.229	1.00	17.62
ATOM	6801	CG1	ILE	227	22.409	-8.017	-10.315	1.00	17.91
ATOM	6802	CG2	ILE	227	23.254	-9.357	-8.460	1.00	19.38
ATOM	6803	H	ILE	227	19.422	-9.521	-9.884	1.00	0.00
ATOM	6804	CD	ILE	227	21.261	-7.439	-11.054	1.00	18.79
ATOM	6805	N	TYR	228	22.216	-12.334	-8.912	1.00	15.79
ATOM	6806	CA	TYR	228	22.259	-13.460	-8.003	1.00	16.65
ATOM	6807	C	TYR	228	23.587	-13.430	-7.257	1.00	17.80
ATOM	6808	O	TYR	228	24.552	-12.831	-7.728	1.00	19.28
ATOM	6809	CB	TYR	228	22.153	-14.769	-8.795	1.00	16.56
ATOM	6810	CG	TYR	228	20.902	-14.884	-9.634	1.00	17.28
ATOM	6811	CD1	TYR	228	20.721	-14.092	-10.766	1.00	17.78
ATOM	6812	CD2	TYR	228	19.873	-15.754	-9.274	1.00	16.86
ATOM	6813	CE1	TYR	228	19.542	-14.157	-11.509	1.00	16.84
ATOM	6814	CE2	TYR	228	18.694	-15.823	-10.013	1.00	14.56
ATOM	6815	CZ	TYR	228	18.538	-15.020	-11.120	1.00	15.15
ATOM	6816	OH	TYR	228	17.359	-15.039	-11.814	1.00	16.78
ATOM	6817	H	TYR	228	22.875	-12.262	-9.601	1.00	0.00
ATOM	6818	HH	TYR	228	16.641	-14.838	-11.203	1.00	0.00
ATOM	6819	N	THR	229	23.639	-14.048	-6.085	1.00	16.85
ATOM	6820	CA	THR	229	24.885	-14.097	-5.340	1.00	17.23
ATOM	6821	C	THR	229	25.679	-15.207	-5.995	1.00	18.33
ATOM	6822	O	THR	229	25.112	-16.240	-6.355	1.00	19.18
ATOM	6823	CB	THR	229	24.659	-14.483	-3.879	1.00	16.41
ATOM	6824	OG1	THR	229	23.586	-13.705	-3.347	1.00	18.40
ATOM	6825	CG2	THR	229	25.913	-14.216	-3.065	1.00	16.08
ATOM	6826	H	THR	229	22.835	-14.458	-5.726	1.00	0.00
ATOM	6827	HG1	THR	229	23.919	-12.996	-2.782	1.00	0.00
ATOM	6828	N	ARG	230	26.968	-14.982	-6.198	1.00	18.45
ATOM	6829	CA	ARG	230	27.806	-15.992	-6.811	1.00	21.08
ATOM	6830	C	ARG	230	28.263	-16.954	-5.725	1.00	24.17
ATOM	6831	O	ARG	230	29.024	-16.577	-4.834	1.00	25.89
ATOM	6832	CB	ARG	230	28.995	-15.338	-7.512	1.00	22.59
ATOM	6833	CG	ARG	230	30.109	-16.297	-7.888	1.00	24.75
ATOM	6834	CD	ARG	230	31.067	-15.680	-8.883	1.00	25.61
ATOM	6835	NE	ARG	230	30.665	-15.951	-10.260	1.00	26.94
ATOM	6836	CZ	ARG	230	30.154	-15.040	-11.080	1.00	27.48
ATOM	6837	NH1	ARG	230	29.978	-13.800	-10.647	1.00	28.61
ATOM	6838	NH2	ARG	230	29.867	-15.354	-12.342	1.00	26.98
ATOM	6839	H	ARG	230	27.357	-14.134	-5.903	1.00	0.00
ATOM	6840	HE	ARG	230	30.801	-16.890	-10.525	1.00	0.00
ATOM	6841	HH11	ARG	230	30.249	-13.518	-9.722	1.00	0.00
ATOM	6842	HH12	ARG	230	29.589	-13.050	-11.204	1.00	0.00
ATOM	6843	HH21	ARG	230	30.021	-16.266	-12.719	1.00	0.00
ATOM	6844	HH22	ARG	230	29.490	-14.661	-12.970	1.00	0.00
ATOM	6845	N	VAL	231	27.806	-18.203	-5.806	1.00	26.09
ATOM	6846	CA	VAL	231	28.153	-19.205	-4.804	1.00	26.32
ATOM	6847	C	VAL	231	29.636	-19.546	-4.730	1.00	26.68

ATOM	9305	CE1	TYR	241	-37.718	-19.089	-12.144	1.00	33.56
ATOM	9306	CE2	TYR	241	-37.143	-19.342	-14.462	1.00	32.65
ATOM	9307	CZ	TYR	241	-37.644	-18.574	-13.427	1.00	33.47
ATOM	9308	OH	TYR	241	-38.081	-17.297	-13.681	1.00	34.49
ATOM	9309	H	TYR	241	-38.465	-23.017	-11.046	1.00	0.00
ATOM	9310	HH	TYR	241	-38.272	-16.853	-12.855	1.00	0.00
ATOM	9311	N	VAL	242	-36.881	-25.165	-11.086	1.00	36.66
ATOM	9312	CA	VAL	242	-36.417	-26.435	-10.548	1.00	37.99
ATOM	9313	C	VAL	242	-37.625	-27.328	-10.253	1.00	41.56
ATOM	9314	O	VAL	242	-38.377	-27.078	-9.301	1.00	41.79
ATOM	9315	CB	VAL	242	-35.585	-26.210	-9.280	1.00	37.17
ATOM	9316	CG1	VAL	242	-34.923	-27.500	-8.848	1.00	36.94
ATOM	9317	CG2	VAL	242	-34.543	-25.135	-9.531	1.00	36.67
ATOM	9318	H	VAL	242	-37.122	-24.457	-10.468	1.00	0.00
ATOM	9319	N	PRO	243	-37.793	-28.408	-11.040	1.00	43.68
ATOM	9320	CA	PRO	243	-38.879	-29.386	-10.945	1.00	46.84
ATOM	9321	C	PRO	243	-39.004	-30.118	-9.625	1.00	50.05
ATOM	9322	O	PRO	243	-38.102	-30.092	-8.788	1.00	49.11
ATOM	9323	CB	PRO	243	-38.551	-30.364	-12.072	1.00	45.09
ATOM	9324	CG	PRO	243	-37.075	-30.359	-12.074	1.00	44.34
ATOM	9325	CD	PRO	243	-36.782	-28.878	-12.003	1.00	44.28
ATOM	9326	N	LYS	244	-40.143	-30.783	-9.464	1.00	55.29
ATOM	9327	CA	LYS	244	-40.438	-31.565	-8.276	1.00	60.05
ATOM	9328	C	LYS	244	-39.625	-32.860	-8.352	1.00	63.67
ATOM	9329	O	LYS	244	-40.174	-33.957	-8.482	1.00	64.35
ATOM	9330	CB	LYS	244	-41.938	-31.862	-8.211	1.00	60.15
ATOM	9331	CG	LYS	244	-42.791	-30.653	-7.865	1.00	61.05
ATOM	9332	CD	LYS	244	-43.134	-30.609	-6.374	1.00	62.36
ATOM	9333	CE	LYS	244	-44.171	-31.678	-6.002	1.00	63.29
ATOM	9334	NZ	LYS	244	-44.659	-31.607	-4.580	1.00	64.30
ATOM	9335	H	LYS	244	-40.808	-30.749	-10.180	1.00	0.00
ATOM	9336	HZ1	LYS	244	-45.082	-30.675	-4.377	1.00	0.00
ATOM	9337	HZ2	LYS	244	-43.921	-31.789	-3.867	1.00	0.00
ATOM	9338	HZ3	LYS	244	-45.422	-32.297	-4.419	1.00	0.00
ATOM	9339	N	LYS	245	-38.305	-32.705	-8.309	1.00	66.44
ATOM	9340	CA	LYS	245	-37.373	-33.820	-8.370	1.00	68.53
ATOM	9341	C	LYS	245	-36.009	-33.348	-7.869	1.00	69.66
ATOM	9342	O	LYS	245	-35.294	-32.619	-8.566	1.00	70.41
ATOM	9343	CB	LYS	245	-37.240	-34.342	-9.803	1.00	69.23
ATOM	9344	CG	LYS	245	-36.186	-35.419	-9.942	1.00	70.70
ATOM	9345	CD	LYS	245	-35.327	-35.202	-11.173	1.00	72.47
ATOM	9346	CE	LYS	245	-34.068	-36.061	-11.112	1.00	74.04
ATOM	9347	NZ	LYS	245	-34.365	-37.507	-10.870	1.00	75.08
ATOM	9348	H	LYS	245	-37.914	-31.819	-8.196	1.00	0.00
ATOM	9349	HZ1	LYS	245	-35.012	-37.891	-11.588	1.00	0.00
ATOM	9350	HZ2	LYS	245	-34.836	-37.655	-9.955	1.00	0.00
ATOM	9351	HZ3	LYS	245	-33.480	-38.050	-10.886	1.00	0.00
TER	9352		LYS	245					
ATOM	9353	C1	APA	301	-23.052	9.766	-6.085	1.00	21.89
ATOM	9354	C2	APA	301	-23.579	10.513	-4.997	1.00	20.39
ATOM	9355	C3	APA	301	-23.246	10.302	-3.667	1.00	19.04
ATOM	9356	C4	APA	301	-22.342	9.304	-3.329	1.00	17.51
ATOM	9357	C5	APA	301	-21.830	8.581	-4.399	1.00	18.86
ATOM	9358	C6	APA	301	-22.121	8.740	-5.754	1.00	20.00
ATOM	9359	C7	APA	301	-23.466	10.066	-7.399	1.00	23.77
ATOM	9360	N8	APA	301	-23.005	9.399	-8.435	1.00	23.70
ATOM	9361	N9	APA	301	-24.338	11.024	-7.665	1.00	25.12
ATOM	9362	C10	APA	301	-21.986	9.068	-1.852	1.00	17.23
ATOM	9363	O13	APA	301	-21.090	11.219	-1.509	1.00	17.21
ATOM	9364	C13	APA	301	-20.987	9.615	0.337	1.00	20.01
ATOM	9365	O14	APA	301	-19.653	9.921	0.187	1.00	22.87
ATOM	9366	O15	APA	301	-21.603	8.975	1.198	1.00	19.00
ATOM	9367	C11	APA	301	-21.854	10.224	-0.842	1.00	17.64

171/176

TER	9368		APA	301					
ATOM	9369	C1	APA	301	14.685	8.995	7.478	1.00	29.74
ATOM	9370	C2	APA	301	15.307	9.757	6.450	1.00	28.66
ATOM	9371	C3	APA	301	14.974	9.689	5.101	1.00	28.70
ATOM	9372	C4	APA	301	13.964	8.829	4.673	1.00	27.81
ATOM	9373	C5	APA	301	13.354	8.080	5.687	1.00	28.73
ATOM	9374	C6	APA	301	13.644	8.102	7.060	1.00	29.27
ATOM	9375	C7	APA	301	15.112	9.161	8.820	1.00	31.33
ATOM	9376	N8	APA	301	14.569	8.489	9.812	1.00	31.41
ATOM	9377	N9	APA	301	16.071	10.007	9.157	1.00	32.37
ATOM	9378	C10	APA	301	13.608	8.778	3.172	1.00	23.98
ATOM	9379	O13	APA	301	12.534	10.880	3.195	1.00	19.67
ATOM	9380	C13	APA	301	12.562	9.671	1.104	1.00	25.12
ATOM	9381	O14	APA	301	11.222	9.922	1.268	1.00	28.11
ATOM	9382	O15	APA	301	13.209	9.204	0.171	1.00	26.06
ATOM	9383	C11	APA	301	13.385	10.085	2.383	1.00	22.13
TER	9384		APA	301					
ATOM	9385	C1	APA	301	14.412	-9.879	-8.288	1.00	29.54
ATOM	9386	C2	APA	301	15.063	-10.684	-7.297	1.00	28.51
ATOM	9387	C3	APA	301	14.787	-10.651	-5.926	1.00	26.17
ATOM	9388	C4	APA	301	13.809	-9.793	-5.438	1.00	26.57
ATOM	9389	C5	APA	301	13.175	-9.008	-6.410	1.00	29.17
ATOM	9390	C6	APA	301	13.403	-8.990	-7.799	1.00	29.83
ATOM	9391	C7	APA	301	14.780	-10.008	-9.666	1.00	29.98
ATOM	9392	N8	APA	301	14.204	-9.292	-10.618	1.00	28.22
ATOM	9393	N9	APA	301	15.712	-10.857	-10.070	1.00	30.35
ATOM	9394	C10	APA	301	13.505	-9.757	-3.920	1.00	24.12
ATOM	9395	O13	APA	301	12.401	-11.842	-3.814	1.00	23.75
ATOM	9396	C13	APA	301	12.639	-10.592	-1.754	1.00	22.24
ATOM	9397	O14	APA	301	11.396	-11.162	-1.619	1.00	23.15
ATOM	9398	O15	APA	301	13.282	-9.828	-1.043	1.00	21.22
ATOM	9399	C11	APA	301	13.335	-11.049	-3.094	1.00	22.34
TER	9400		APA	301					
ATOM	9401	C1	APA	301	-22.920	-11.214	6.535	1.00	24.69
ATOM	9402	C2	APA	301	-23.653	-11.777	5.444	1.00	23.01
ATOM	9403	C3	APA	301	-23.337	-11.590	4.104	1.00	20.07
ATOM	9404	C4	APA	301	-22.246	-10.910	3.763	1.00	19.42
ATOM	9405	C5	APA	301	-21.540	-10.267	4.831	1.00	21.55
ATOM	9406	C6	APA	301	-21.797	-10.411	6.192	1.00	23.08
ATOM	9407	C7	APA	301	-23.330	-11.471	7.860	1.00	25.81
ATOM	9408	N8	APA	301	-22.689	-10.970	8.899	1.00	26.10
ATOM	9409	N9	APA	301	-24.370	-12.226	8.134	1.00	27.77
ATOM	9410	C10	APA	301	-21.895	-10.591	2.291	1.00	19.43
ATOM	9411	O13	APA	301	-20.749	-12.620	1.974	1.00	24.12
ATOM	9412	C13	APA	301	-20.945	-11.102	0.078	1.00	20.17
ATOM	9413	O14	APA	301	-19.594	-11.393	0.068	1.00	19.31
ATOM	9414	O15	APA	301	-21.655	-10.445	-0.680	1.00	19.78
ATOM	9415	C11	APA	301	-21.683	-11.760	1.321	1.00	19.90
TER	9416		APA	301					
CONNECT	6	5	9						
CONNECT	9	6							
CONNECT	211	209	210	214					
CONNECT	214	211							
CONNECT	275	273	274	278					
CONNECT	278	275							
CONNECT	330	329	333						
CONNECT	333	330							
CONNECT	343	341	342	346					
CONNECT	346	343							
CONNECT	429	427	428	432					
CONNECT	432	429							
CONNECT	623	621	622	626					
CONNECT	626	623							

172/176

CONNECT 760 759 763
CONNECT 763 760
CONNECT 769 768 772
CONNECT 772 769
CONNECT 790 788 789 793
CONNECT 793 790
CONNECT 871 870 874
CONNECT 874 871
CONNECT 900 899 903
CONNECT 903 900
CONNECT 1028 1026 1027 1031
CONNECT 1031 1028
CONNECT 1049 1047 1048 1052
CONNECT 1052 1049
CONNECT 1445 1444 1448
CONNECT 1448 1445
CONNECT 1488 1486 1487 1491
CONNECT 1491 1488
CONNECT 1497 1496 1500
CONNECT 1500 1497
CONNECT 1559 1557 1558 1562
CONNECT 1562 1559
CONNECT 1659 1658 1662
CONNECT 1662 1659
CONNECT 2125 2124 2128
CONNECT 2128 2125
CONNECT 2253 2252 2256
CONNECT 2256 2253
CONNECT 2266 2264 2265 2269
CONNECT 2269 2266
CONNECT 2279 2277 2278 2282
CONNECT 2282 2279
CONNECT 2344 2343 2347
CONNECT 2347 2344
CONNECT 2549 2547 2548 2552
CONNECT 2552 2549
CONNECT 2613 2611 2612 2616
CONNECT 2616 2613
CONNECT 2668 2667 2671
CONNECT 2671 2668
CONNECT 2681 2679 2680 2684
CONNECT 2684 2681
CONNECT 2767 2765 2766 2770
CONNECT 2770 2767
CONNECT 2961 2959 2960 2964
CONNECT 2964 2961
CONNECT 3098 3097 3101
CONNECT 3101 3098
CONNECT 3107 3106 3110
CONNECT 3110 3107
CONNECT 3128 3126 3127 3131
CONNECT 3131 3128
CONNECT 3209 3208 3212
CONNECT 3212 3209
CONNECT 3238 3237 3241
CONNECT 3241 3238
CONNECT 3366 3364 3365 3369
CONNECT 3369 3366
CONNECT 3387 3385 3386 3390
CONNECT 3390 3387
CONNECT 3783 3782 3786
CONNECT 3786 3783
CONNECT 3826 3824 3825 3829

173/176

CONNECT 3829 3826
CONNECT 3835 3834 3838
CONNECT 3838 3835
CONNECT 3897 3895 3896 3900
CONNECT 3900 3897
CONNECT 3997 3996 4000
CONNECT 4000 3997
CONNECT 4463 4462 4466
CONNECT 4466 4463
CONNECT 4591 4590 4594
CONNECT 4594 4591
CONNECT 4604 4602 4603 4607
CONNECT 4607 4604
CONNECT 4617 4615 4616 4620
CONNECT 4620 4617
CONNECT 4682 4681 4685
CONNECT 4685 4682
CONNECT 4887 4885 4886 4890
CONNECT 4890 4887
CONNECT 4951 4949 4950 4954
CONNECT 4954 4951
CONNECT 5006 5005 5009
CONNECT 5009 5006
CONNECT 5019 5017 5018 5022
CONNECT 5022 5019
CONNECT 5105 5103 5104 5108
CONNECT 5108 5105
CONNECT 5299 5297 5298 5302
CONNECT 5302 5299
CONNECT 5436 5435 5439
CONNECT 5439 5436
CONNECT 5445 5444 5448
CONNECT 5448 5445
CONNECT 5466 5464 5465 5469
CONNECT 5469 5466
CONNECT 5547 5546 5550
CONNECT 5550 5547
CONNECT 5576 5575 5579
CONNECT 5579 5576
CONNECT 5704 5702 5703 5707
CONNECT 5707 5704
CONNECT 5725 5723 5724 5728
CONNECT 5728 5725
CONNECT 6121 6120 6124
CONNECT 6124 6121
CONNECT 6164 6162 6163 6167
CONNECT 6167 6164
CONNECT 6173 6172 6176
CONNECT 6176 6173
CONNECT 6235 6233 6234 6238
CONNECT 6238 6235
CONNECT 6335 6334 6338
CONNECT 6338 6335
CONNECT 6801 6800 6804
CONNECT 6804 6801
CONNECT 6929 6928 6932
CONNECT 6932 6929
CONNECT 6942 6940 6941 6945
CONNECT 6945 6942
CONNECT 6955 6953 6954 6958
CONNECT 6958 6955
CONNECT 7020 7019 7023
CONNECT 7023 7020

179/176

CONECT 7225 7223 7224 7228
CONECT 7228 7225
CONECT 7289 7287 7288 7292
CONECT 7292 7289
CONECT 7344 7343 7347
CONECT 7347 7344
CONECT 7357 7355 7356 7360
CONECT 7360 7357
CONECT 7443 7441 7442 7446
CONECT 7446 7443
CONECT 7637 7635 7636 7640
CONECT 7640 7637
CONECT 7774 7773 7777
CONECT 7777 7774
CONECT 7783 7782 7786
CONECT 7786 7783
CONECT 7804 7802 7803 7807
CONECT 7807 7804
CONECT 7885 7884 7888
CONECT 7888 7885
CONECT 7914 7913 7917
CONECT 7917 7914
CONECT 8042 8040 8041 8045
CONECT 8045 8042
CONECT 8063 8061 8062 8066
CONECT 8066 8063
CONECT 8459 8458 8462
CONECT 8462 8459
CONECT 8502 8500 8501 8505
CONECT 8505 8502
CONECT 8511 8510 8514
CONECT 8514 8511
CONECT 8573 8571 8572 8576
CONECT 8576 8573
CONECT 8673 8672 8676
CONECT 8676 8673
CONECT 9139 9138 9142
CONECT 9142 9139
CONECT 9267 9266 9270
CONECT 9270 9267
CONECT 9280 9278 9279 9283
CONECT 9283 9280
CONECT 9293 9291 9292 9296
CONECT 9296 9293
CONECT 9353 9354 9358 9359
CONECT 9354 9353 9355
CONECT 9355 9354 9356
CONECT 9356 9355 9357 9362
CONECT 9357 9356 9358
CONECT 9358 9353 9357
CONECT 9359 9353 9360 9361
CONECT 9360 9359
CONECT 9361 9359
CONECT 9362 9356 9367
CONECT 9363 9367
CONECT 9364 9365 9366 9367
CONECT 9365 9364
CONECT 9366 9364
CONECT 9367 9362 9363 9364
CONECT 9369 9370 9374 9375
CONECT 9370 9369 9371
CONECT 9371 9370 9372
CONECT 9372 9371 9373 9378

175/176

CONNECT 9373 9372 9374
CONNECT 9374 9369 9373
CONNECT 9375 9369 9376 9377
CONNECT 9376 9375
CONNECT 9377 9375
CONNECT 9378 9372 9383
CONNECT 9379 9383
CONNECT 9380 9381 9382 9383
CONNECT 9381 9380
CONNECT 9382 9380
CONNECT 9383 9378 9379 9380
CONNECT 9385 9386 9390 9391
CONNECT 9386 9385 9387
CONNECT 9387 9386 9388
CONNECT 9388 9387 9389 9394
CONNECT 9389 9388 9390
CONNECT 9390 9385 9389
CONNECT 9391 9385 9392 9393
CONNECT 9392 9391
CONNECT 9393 9391
CONNECT 9394 9388 9399
CONNECT 9395 9399
CONNECT 9396 9397 9398 9399
CONNECT 9397 9396
CONNECT 9398 9396
CONNECT 9399 9394 9395 9396
CONNECT 9401 9402 9406 9407
CONNECT 9402 9401 9403
CONNECT 9403 9402 9404
CONNECT 9404 9403 9405 9410
CONNECT 9405 9404 9406
CONNECT 9406 9401 9405
CONNECT 9407 9401 9408 9409
CONNECT 9408 9407
CONNECT 9409 9407
CONNECT 9410 9404 9415
CONNECT 9411 9415
CONNECT 9412 9413 9414 9415
CONNECT 9413 9412
CONNECT 9414 9412
CONNECT 9415 9410 9411 9412
MASTER 0 0 0 0 0 0 0 0 9408 8 244 80
END

176/176